

Titre: Simulation du cycle de refroidissement lors de la coulée d'explosifs
Title: fusibles

Auteur: Warren Sanhye
Author:

Date: 2015

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Sanhye, W. (2015). Simulation du cycle de refroidissement lors de la coulée d'explosifs fusibles [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal].
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/1988/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1988/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** Charles Dubois
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATION DU CYCLE DE REFROIDISSEMENT LORS DE LA COULÉE
D'EXPLOSIFS FUSIBLES

WARREN SANHYE

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)

DÉCEMBRE 2015

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

SIMULATION DU CYCLE DE REFROIDISSEMENT LORS DE LA COULÉE
D'EXPLOSIFS FUSIBLES

présenté par : SANHYE Warren

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. BERTRAND François, Ph. D., président

M. DUBOIS Charles, Ph. D., membre et directeur de recherche

Mme HEUZEY Marie-Claude, Ph. D., membre

DÉDICACE

À mes parents

REMERCIEMENTS

Je tiens d'abord à remercier mon directeur de recherche, Charles Dubois, pour m'avoir guider tout au long de ce projet. Par le passé, j'ai eu le plaisir de travailler avec Charles, d'abord à titre d'étudiant dans les cours de GCH3510 et GCH3100A. Charles est un homme exceptionnellement brillant et c'est son savoir qui donne envie de collaborer avec lui. J'ai eu l'occasion de le faire dans un projet de fin d'études qui portait sur la modélisation numérique et c'est le déclic qui m'a poussé vers la poursuite des études supérieures. Mon choix de directeur était donc fait d'avance et je suis reconnaissant qu'il m'ait accepté pour ce travail de recherche, jalonné de gros défis.

J'aimerais également saluer mes collègues à l'URPEI. Malgré le fait que je ne faisais pas partie de cette unité de recherche, ils m'ont accueilli chaleureusement au pavillon André-Aisendadt. Je n'oublierai pas: le rire de Kalonji; le peps d'Hicham, mon "voisin" de bureau; le "bon goût" et les conseils d'Hamed; l'air joviale de Christine; la zen attitude de Manon; le jeu espiègle de Guillaume; le regard vicieux de Jean-Michel; le look dévergondé d'Olivier; le génie et l'obsession compulsive du sport de Bruno; et enfin, les jeux de mots intentionnellement pourris de David! D'ailleurs, j'en profite pour remercier personnellement Bruno et David qui m'ont beaucoup aidé dans mon raisonnement scientifique et mon épanouissement académique. Je ressortirai de cette expérience en étant enrichi: merci les gars!

Mes remerciements vont aussi à notre partenaire industriel, General Dynamics-OTS Canada. Merci à Pierre et Isabelle pour avoir accepté cette aventure avec Charles et moi. En particulier, je tiens à remercier Isabelle pour son aide précieuse dans le cadre de ce projet et pour m'avoir beaucoup appris dans ce domaine particulier. Ce fut un plaisir de collaborer avec elle, et je suis confiant pour la continuité du projet dans le futur.

Je dédie particulièrement ce mémoire à ma famille pour leur support tout au long de cette aventure. Maman, Papa, Sandra: vous m'avez soutenu dès le départ et je vous remercie pour tout! Si j'ai toujours voulu remplir au mieux mes objectifs académiques, c'est surtout grâce à vous et aux valeurs que vous m'avez inculquées. Enfin, je voudrais partager l'accomplissement de ce travail avec celle qui fait partie de ma vie depuis bientôt 4 ans. Merci Clémence pour ta patience, ton réconfort et aussi pour m'avoir écouté et motivé dans les moments les plus difficiles. Je suis fier de t'avoir à mes côtés.

RÉSUMÉ

L'utilisation d'outils numériques dans l'industrie de la défense est en pleine essor, notamment pour la mise en œuvre des explosifs fusibles. Les matériaux énergétiques étant visqueux et possédant une faible conductivité thermique, ils sont caractérisés par un nombre de Prandtl élevé. Par conséquent, le cycle de refroidissement de ces matériaux spéciaux est très long comparé à la coulée de métaux, par exemple. Il est donc impératif d'optimiser ce cycle de refroidissement qui se trouve être l'étape clé dans la mise en forme des matériaux énergétiques.

La présente étude met en avant un outil numérique construit avec COMSOL Multiphysics et qui est consacré à la modélisation de la solidification et des contraintes résiduelles engendrées lors du refroidissement d'un matériau énergétique appelé Composition B. La simulation permet de détecter le retrait et comprend une fonction CZM (Cohesive Zone Modeling) pour modéliser l'adhérence aux parois de l'obus. L'étude contient aussi plusieurs étapes de vérification et de validation (V & V), concept important dans le milieu industriel pour assurer performance et fiabilité. Le concept est utilisé ici dans un cadre numérique à différents niveaux. Premièrement, l'approche de solidification a été vérifiée grâce à un problème de référence. Ensuite, un modèle complet incluant la convection naturelle dans le fondu, le changement de phase et le calcul de contraintes thermiques a été développé pour un cylindre. Enfin, une étude de convergence impliquant un raffinement de maillage a permis de vérifier l'exactitude de la modélisation.

Par la suite, un modèle plus réaliste d'un obus de 105 mm a été construit et les résultats numériques ont été validés par comparaison avec les profils de température obtenus pour un montage expérimental. De plus, ce modèle a permis de prédire la taille et l'emplacement probable de retrait autour de la cloche de l'obus. L'emphase a été également mis sur une technique particulière pour optimiser le refroidissement, à savoir, l'utilisation d'une sonde thermique. Les résultats ont démontré que la fonction première de la sonde était de maintenir le cœur de la pièce chaud et d'ainsi empêcher la formation de porosités ou de vides suite au changement de phase et à la contraction. La simulation numérique confirme aussi une diminution de 23 % du retrait par cette technique. Au terme de ce projet, il est attendu que le partenaire industriel General Dynamics OTS - Canada puisse en utiliser les retombées afin d'optimiser ses lignes de production.

ABSTRACT

Numerical modeling of melt-casting is becoming a popular tool for the energetic materials and explosives industry. Compared to traditional metal casting, the cooling cycle for explosive melts is significantly longer because of their viscosity and low conductivity which results in high Prandtl numbers. Improving the casting process is crucial and readily depends on optimizing the cooling cycle. Furthermore, air entrapment or void formation due to shrinkage can affect the product quality with respect to its combustion/detonation.

A comprehensive numerical tool built through COMSOL Multiphysics is proposed and focused to model the solidification process and the development of stresses during the cooling of an explosive formulation melt, namely Composition B. The simulation tool includes the effect of adhesion to the shell through the use of a Cohesive Zone Model (CZM) function and it can also account for the formation of gaps due to shrinkage. The core of the modeling work was developed following a verification and validation (V & V) methodology, which is important in various industries to ensure performance and reliability. In the first phase, the chosen approach for solidification was verified against a benchmark problem. Then, a complete numerical model including melt flow, solidification and thermal stresses was set up and run for a simple cylindrical geometry. A mesh refinement study was also performed at this stage to confirm the degree of accuracy of the solution.

During the second phase of the project, a new numerical model was built for an actual 105 mm caliber geometry. Numerical predictions were validated with temperature profiles recorded for an actual 105 mm experimental setup. The model also predicted the probable size and location of gap formation, i.e. around the neck region of the explosive shell. The benefits of probe heating to control solidification were also emphasized. The probe's main function was to prevent void formation by keeping the central trunk of the casting hot as long as required. It was also shown that the use of this hot probe during the cooling process can help to reduce gap sizes up to 23 %. The fallouts of this research project are aimed for the industrial partner - General Dynamics OTS Canada to optimize its own production schemes.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	III
REMERCIEMENTS	IV
RÉSUMÉ	V
ABSTRACT	VI
TABLE DES MATIÈRES	VII
LISTE DES TABLEAUX	X
LISTE DES FIGURES	XI
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	XIII
LISTE DES ANNEXES	XVI
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Mise en contexte	1
1.2 Objectifs de recherche	3
1.3 Contenu de mémoire	3
CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE	5
2.1 Le caractère multi-physiques de la mise en œuvre des explosifs	5
2.2 Les approches de suivi des surfaces libres	7
2.2.1 Les méthodes à grille fixe	8
2.2.2 Les méthodes à grille mobile	13
2.3 La modélisation du changement de phase	13
2.3.1 La méthode de l'enthalpie	15
2.3.2 Le modèle de solidification de Voller et Prakash	17
2.4 Le comportement thermomécanique dans les modèles de coulée.	18

2.4.1	Les notions générales	18
2.4.2	Les difficultés numériques de la modélisation des contraintes thermiques	19
2.4.3	Le contact et l'adhérence aux parois	20
CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE.....		25
3.1	Approche de modélisation	25
3.2	Construction d'un modèle FTM (Fluide-Thermique-Mécanique)	27
3.3	Ajout de l'adhérence et traitement de la séparation aux parois	31
3.4	Composantes expérimentales du projet de recherche	33
3.5	Étude sur un modèle diphasique incluant des bulles d'air.....	34
CHAPITRE 4 ARTICLE 1: NUMERICAL MODELING OF THE COOLING CYCLE AND ASSOCIATED THERMAL STRESSES IN A MELT EXPLOSIVE CHARGE		36
4.1	Introduction.....	37
4.2	Methodology	42
4.2.1	Numerical model.....	42
4.2.2	Gap considerations.....	45
4.2.3	Overall coupling methodology	47
4.2.4	Mesh refinement study - convergence analysis	49
4.3	Results & discussion	50
4.3.1	Cylinder geometry testing.....	50
4.3.2	Generic 105 mm caliber casting	61
4.4	Conclusions.....	68
CHAPITRE 5 DISCUSSION GÉNÉRALE.....		69
5.1	Le choix de la grille de calcul	69
5.2	L'influence de l'intervalle de température 2ε	69

5.3	Les retombées de l'étude de convergence	70
5.4	Difficultés de mesure de l'adhérence	71
5.5	Limites du modèle développé	72
CHAPITRE 6 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS.....		73
RÉFÉRENCES		75
ANNEXES.....		78

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1 Propriétés du matériau test et autres données pour le problème de vérification.....	26
Tableau 3.2 Principaux entrants au modèle de simulation	28
Tableau 3.3 Propriétés thermomécaniques de la Composition B	29
Table 4.1 Thermal and physical properties of the Composition B melt used.....	42
Table 4.2 Thermo-mechanical properties of the mold and funnel.....	42
Table 4.3 Grid levels used for mesh refinement study	49
Table 4.4 Comparison of thermal diffusivities	52
Tableau 5.1 Examen qualitatif des échantillons	71

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Champs reliés dans le contexte des problèmes de coulée (Cruchaga et al., 2004).....	6
Figure 2.2 Gouttelette solidifiant sur une plaque froide ($t = 25\text{ms}$).....	8
Figure 2.3 Domaine diphasique	9
Figure 2.4 Portion de liquide en solidification.....	15
Figure 2.5 Définition des propriétés physiques du matériau pour le calcul du changement de phase (Reddy & Gartling, 2001).....	16
Figure 2.6 Contact Hertzien entre deux corps élastiques (Adams & Nosonovsky, 2000).....	22
Figure 2.7 (a) Le modèle DB classique (b) modèle modifié pour la simulation numérique (Aksak et al., 2010)	24
Figure 3.1 Pièce cylindrique(Weiner & Boley, 1963)	25
Figure 3.2 Plaque en solidification (adaptée de (Weiner & Boley, 1963)).....	26
Figure 3.3 Calibre de 105 mm	27
Figure 3.4 Montage pour test de traction	33
Figure 3.5 Plan vertical d'un cylindre avec des "bulles d'air"	35
Figure 4.1 Cylinder geometry	41
Figure 4.2 Generic 105 mm caliber shell.....	41
Figure 4.3 Temperature-dependent Young's modulus for Composition B melt.....	43
Figure 4.4 Equivalent thermal circuit for gap conductance	46
Figure 4.5 Coupling pathway.....	48
Figure 4.6 Mesh used for the cylindrical geometry	49
Figure 4.7 Schematic view of the surrounding environment of the cylindrical casting	51
Figure 4.8 Different probe locations (half of geometry shown)	52
Figure 4.9 Temperature evolution at selected positions for the cylinder casting	53

Figure 4.10 Radial temperature evolution at half the height of the cylinder and time $t = 50$ min	53
Figure 4.11 Evolution of the solid front (only explosive domain shown, mold walls omitted)	54
Figure 4.12 Velocity magnitude (coloured and in m/s) and velocity field direction (dark arrows) for selected times (only explosive domain shown, mold walls omitted).....	55
Figure 4.13 Evolution of the overall solidification process	56
Figure 4.14 von Mises Stresses (color legend in MPa)	57
Figure 4.15 Evolution of gap at mold-shell interface and related stress level. The red color on the 2D plot indicates the region where the gap size has exceeded the displacement at break for the adhesive force (as opposed to the green portions)	58
Figure 4.16 Temperature field (in K) at time $t = 4500$ seconds.....	60
Figure 4.17 105 mm caliber casting with probe	62
Figure 4.18 Comparison of temperature profiles between numerical and experimental results ...	63
Figure 4.19 Solidification level (pure solid = 1) at 50 min for (a) casting with probe heating (b) without probe. Zoomed region in (c) with black arrows representing velocity field	64
Figure 4.20 Von Mises stresses (in MPa) at 65 min for (a) without probe and (b) with probe	66
Figure 4.21 Formation of gap at shoulder position.....	67
Figure 5.1 Dépendance de la température ($\frac{df_l}{dt}$) en fonction de la position radiale dans le cylindre et pour différents demi-intervalles e	70
Figure A.1 Profils de températures comparés pour le problème de Weiner et Boley	78
Figure B.1 Courbes de traction pour tests d'adhérence.....	82

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Symboles

α	Diffusivité thermique
b	Coefficient de dilatation thermique
c_p	Chaleur spécifique
C	Constante du modèle de Voller et Prakash
δ	Fonction delta de Dirac
δ_{ij}	Delta de Kronecker
\in	Déformation
e	Largeur capillaire de l'interface; demi-longueur de l'intervalle de la région trouble
\mathbf{F}	Body force
f_l	Fraction liquide
γ	Tension de surface
Γ	Frontière du domaine ou l'interface entre deux fluides
\mathbf{g}	Gravité
g_n	Espace entre deux surfaces distincts
κ	Courbure de l'interface
k	Conductivité thermique
L	Chaleur latente
l	Énergie de mélange
M	Facteur de mobilité
μ	Viscosité dynamique

\mathbf{n}	Vecteur normal
Ω_i	Domaine i
p	Pression
q	Constante du modèle de Voller et Prakash
ψ	Potentiel chimique
R	Rayon des particules solides
ρ	Masse volumique
σ	Tenseur de contraintes
\mathbf{t}	Vecteur tangentiel
t	Variable de temps
t_n	Pression de contact normale
T	Température
ϕ	Variable <i>phase field</i>
\mathbf{u}	Vecteur de déplacement
\mathbf{v}	Vecteur vitesse du fluide
n	Coefficient de Poisson

Abréviations

F	Physique d'écoulement de fluide
CZM	Cohesive Zone Model
CFD	Computational Fluid Dynamics
ALE	Arbitrary Lagrangian-Eulerian
FEM	Méthode des éléments finis

FT	Modèle couplé écoulement-thermique
FTM	Modèle couplé écoulement-thermique-mécanique
LSM	Level Set Method
M	Champ mécanique
MAC	Marker-and-cell
S	Champ d'ordre structurel
T	Champ thermique
TM	Modèle couplé thermique-mécanique
VOF	Volume of fluid

LISTE DES ANNEXES

Annexe A - comparaison et solution semi-analytique du problème test de solidification.....	78
Annexe B - courbes de traction.....	82
Annexe C - Code de génération de bulles/sphères.....	83

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

Les matériaux énergétiques, particulièrement les explosifs fusibles, sont des pièces maîtresses au fonctionnement de l'industrie de la défense. Aujourd'hui, elles occupent également une part grandissante dans le secteur des exploitations minières. De manière générale, la mise en forme de ces explosifs fusibles est divisée en trois grandes étapes: la fusion et le mélange de l'explosif (et de ses additifs), la coulée en forme et le refroidissement de la pièce solidifiée (Coulouarn, Aumasson, Lamy-Bracq, & Sta, 2013). Il s'agit d'une méthode très économique pour des remplissages de munitions à grande échelle (General Dynamics, communication personnelle, 20 juin 2014). De nos jours, les nouvelles formulations d'explosifs étant très sensibles, elles requièrent des conditions de mise en œuvre différentes à celle du procédé traditionnel pour la tolite (TNT). La coulée a d'ailleurs longtemps relevé de l'essai et erreur, en se basant sur des données antérieures et sur d'autres types de munitions (Coulouarn et al., 2013). Toutefois, il est évident que ce genre de pratique peut conduire à des pertes de temps et de ressources considérables.

C'est dans cette optique que ce projet de recherche s'inscrit, en collaboration avec General Dynamics-OTS Canada, basé à Repentigny. La problématique ciblée concerne plus particulièrement l'étape de refroidissement de la mise en forme d'explosifs fusibles. Il s'agit là de l'étape la plus critique de la mise en œuvre: un cycle de refroidissement inadéquat de la pièce est souvent la cause de fissures, de porosités et autres défauts qui sont susceptibles d'influencer la qualité du produit (Pelletier et al., 2009). Et dans un souci de développer des produits spéciaux plus performants, les industries impliquées n'ont d'autre choix que de trouver de nouvelles approches afin de rendre leurs lignes de coulage plus efficaces et être ainsi plus compétitifs. Une des avenues intéressantes à exploiter est l'utilisation d'outils de simulation numérique pour modéliser le cycle de refroidissement et ainsi explorer des possibilités d'amélioration tout en sauvant des coûts liés à la R & D.

Toutefois, le développement de ce type de modélisation numérique est complexe, d'une part au niveau conceptuel et d'autre part, au niveau de la collecte d'informations au sein d'un domaine d'activité très contingenté. La phase de refroidissement lors de la mise en forme des

matériaux énergétiques est un procédé multi-physiques qui implique de nombreux défis numériques. En effet, il faut tenir compte de l'écoulement non-isotherme du fondu ainsi que du changement de phase et ce, de façon simultanée. À ce propos, le processus de solidification est un des grands défis techniques de ce travail de recherche, notamment parce qu'il implique un changement de propriétés et de volume, tout deux étant délicats à traiter d'un point de vue numérique. Dans la mise en œuvre des explosifs, le retrait amené par ce changement de phase est souvent la cause de défauts dans le produit fini.

Par ailleurs, de récentes études (Coulouarn et al., 2013; Sun, Annapragada, Garimella, & Singh, 2007) et des observations expérimentales (General Dynamics-OTS Canada, communication personnelle, 20 juin 2014) ont également démontré que le refroidissement de la pièce solidifiée jusqu'à température ambiante s'accompagne de contraintes résiduelles (thermiques) qui peuvent nuire à la qualité de la munition. De plus, sous l'effet de la contraction et de ces contraintes, un décollement de la pièce est probable, notamment au niveau de la cloche. Ce décollement ou séparation peut aussi dépendre de d'autres facteurs tels que l'adhérence entre l'obus et la pièce solidifiée ou encore, la forme de l'obus. Ainsi, il est extrêmement pertinent d'inclure une composante thermomécanique au modèle numérique afin d'avoir une meilleure compréhension du développement des contraintes thermiques et d'étudier l'effet d'un décollement potentiel. En résumé, un modèle numérique complet est recherché dans ce travail et il intègre les phénomènes physiques suivants:

- Transfert de chaleur
- Écoulement non-isotherme
- Changement de phase
- Contraintes thermiques
- Phénomène de contact adhésif
- Écoulement diphasique (dans le cas de la présence de bulles d'air initialement dans le fondu)

1.2 Objectifs de recherche

L'objectif général de la recherche est de développer un outil de simulation numérique pour représenter la mise en forme des matériaux énergétiques, avec en perspective des avenues à explorer pour optimiser le cycle de refroidissement. Cet objectif s'inscrit dans un cadre visant à améliorer la performance et la fiabilité des obus explosifs, notamment pour le partenaire industriel General Dynamics-OTS Canada qui pourra profiter des retombées du projet dans le développement de formulations explosives plus novatrices comme le 2,4 dinitroanisole (DNAN). Les objectifs spécifiques qui ont trait au projet de recherche et qui ont été validés auprès du partenaire industriel sont les suivants:

1. Bâtir une simulation numérique du cycle de refroidissement d'un explosif fusible (la Composition B) dans une géométrie simple - un cylindre.
2. Étudier l'influence des contraintes thermiques induites lors du refroidissement.
3. Analyser des profils de refroidissement spécifiques dans un calibre de 105 mm pour réduire le risque de défauts tels que le retrait excessif, la fissuration et les porosités.

1.3 Contenu de mémoire

Ce mémoire est organisé de la manière suivante:

- Le chapitre 2 est une revue de littérature qui s'étend sur les différentes composantes qui sont nécessaires à la construction d'une simulation numérique complète du procédé de coulée, à savoir:
 - le caractère multi-physiques de la mise en œuvre des explosifs fusibles
 - Un sommaire des approches de suivi des surfaces libres
 - La modélisation numérique du changement de phase
 - Le traitement des problèmes thermomécaniques en modélisation
- Le chapitre 3 présente la méthode générale utilisée pour bâtir le modèle ainsi qu'une description des outils et supports nécessaires au travail de recherche.

- Le chapitre 4 est dédié à l'article qui découle du travail accompli dans le projet de recherche.
- Le chapitre 5 regroupe une discussion générale autour du travail de recherche.
- Le chapitre 6 présente les conclusions de l'étude ainsi que les recommandations pour la continuité des travaux dans le domaine et au sein du groupe de recherche.

CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE

L'utilisation d'approches numériques pour simuler les procédés de coulée suscite un grand intérêt depuis plus de trente ans. C'est d'ailleurs ce que notent Bellet et Thomas (Bellet & Thomas, 2007), notamment par rapport au coulage de métaux comme l'acier. Dans le cas des explosifs fusibles, l'état de l'art sur la simulation numérique est bien plus récente. En effet, si le caractère multi-physiques est commun à tout type de coulée indépendamment du produit, la solidification de fondus avec des nombres de Prandtl élevés comporte des difficultés supplémentaires; les matériaux énergétiques ainsi que les polymères font partie de cette catégorie (Sun et al., 2007) et depuis une dizaine d'années, plusieurs chercheurs se penchent sur la compréhension du processus de solidification de ce type de matériaux. La revue de littérature qui suit présente les principaux aspects de la modélisation des procédés de coulée - le changement de phase, l'écoulement polyphasique ou encore le développement de contraintes thermiques.

2.1 Le caractère multi-physiques de la mise en œuvre des explosifs

En 2003, Cruchaga et Celentano proposent une formulation intégrée pour l'analyse des procédés de coulée en général (Cruchaga, Celentano, & Lewis, 2004). Il s'agit là de démontrer le besoin de regrouper différents phénomènes physiques au sein d'un même modèle afin de caractériser correctement la mise en forme. Selon Cruchaga et son équipe, de manière générale, quatre champs interconnectés font l'objet des problèmes de coulée - les champs d'écoulement du fluide (F), thermique (T), mécanique (M) et d'ordre structurel (S). Chacun de ces champs ont des variables d'état associées:

- Écoulement du fluide - le vecteur vitesse \mathbf{v} du fluide et la pression p
- Thermique - la température T et sa dérivée temporelle $\frac{\partial T}{\partial t}$
- Mécanique - le déplacement \mathbf{u} , le tenseur de contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ et la l'interstice g_n à l'interface entre le moule et la pièce.
- Structurel - la fraction liquide f_l et R pour dénoter une variable liée à la microstructure telle que le rayon des particules solides.

Selon les applications et des objectifs fixés, deux ou plus de ces champs peuvent être interconnectés. Par exemple, si l'on s'intéresse uniquement à un écoulement non-isotherme, un modèle couplé écoulement-thermique (FT) sera utilisé; si l'intérêt est autour des contraintes thermiques développées dans la pièce solide, alors un modèle thermomécanique est choisi (TM). La Figure 2.1 illustre la relation entre ces différents champs et explique comment ils sont inévitablement couplés dans un problème de mise en coulée.

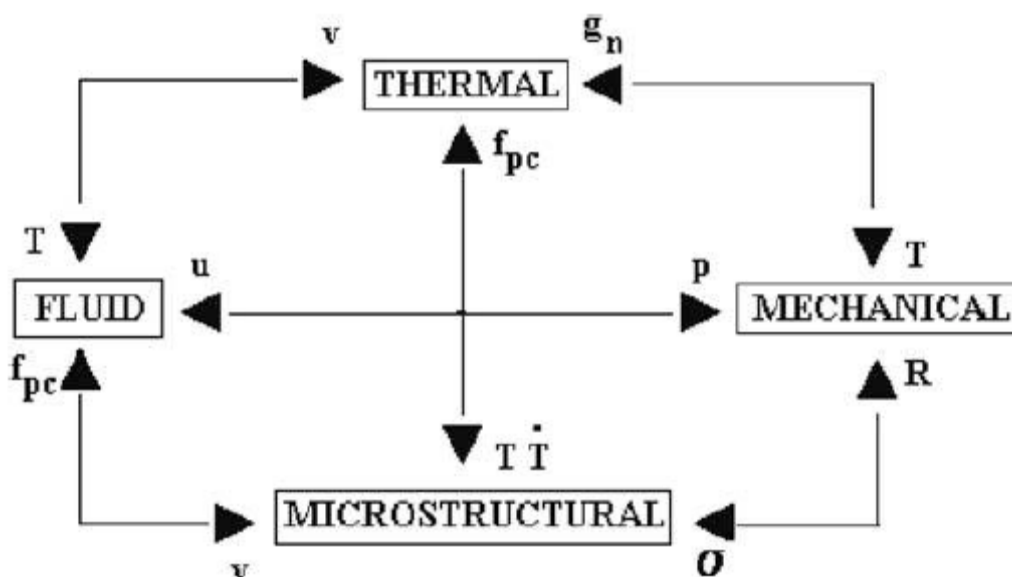


Figure 2.1 Champs reliés dans le contexte des problèmes de coulée (Cruchaga et al., 2004)

Dans le cadre de ce projet de maîtrise, l'accent est sur la dernière étape de la mise en forme de l'explosif, à savoir le cycle de refroidissement. La solidification et le refroidissement de la pièce coulée sont des deux étapes multi-physiques et qui suscitent récemment beaucoup d'intérêt dans le contexte des explosifs fusibles. À ce propos, Sun et Garimella (Sun et al., 2007; Sun, Garimella, Singh, & Naik, 2005) font partie de ceux dont les travaux ont eu une influence considérable.

Dans un premier article en 2005, Sun, Garimella et leurs collaborateurs exposent leurs travaux de simulation numérique pour un procédé de coulée de mélanges explosifs. Comme le soulignent les auteurs, selon de la composition, le fondu peut être considéré comme newtonien ou non-newtonien. Avec un pourcentage élevé de particules solides, il est possible de considérer ce fondu comme isotrope et newtonien (Mudryy & Nastac, 2013; Sun et al., 2007; Sun et al., 2005).

Dans ce premier article, Sun, Garimella et leurs collègues utilisent un modèle FTM sans toutefois se pencher sur la question de contraintes résiduelles et de retrait (décollement de la pièce du moule laissant paraître une interstice). Pour simplifier le problème, ils considèrent le fondu comme un seul matériau et ne tiennent pas compte des particules en suspension ou de la présence de bulles d'air résiduelles, phénomènes communs et problématiques dans les procédés de coulée. Cette hypothèse est pratique car prendre en considération toutes les composantes du mélange énergétique reviendrait à traiter un grand volume de sauts de propriétés (masse volumique, viscosité, etc.) dans le domaine de calcul. Comme il en est discuté en détail à la section 2.2, ceci peut vite compliquer la convergence vers une solution.

De manière générale, dès que la formulation du problème s'intensifie, les défis au niveau du calcul numérique sont naturellement de taille. À titre d'exemple, pour les problèmes thermomécaniques, en dépit des avancées dans la capacité de calcul des ordinateurs, le couplage reste généralement difficile dus à des gradients de température importants de solidification et à la non-linéarité inhérente aux problèmes de mécanique de solides continus (Bellet & Thomas, 2007). Les sous-sections suivantes décortiquent chaque aspect de la simulation multi-physiques des problèmes de solidification.

2.2 Les approches de suivi des surfaces libres

Une surface libre est la frontière entre deux fluides (entre l'eau et l'air, par exemple). Dans le cas où le fluide n'est pas affecté par des champs externes (comme la gravité), les forces de cohésion déterminent la forme de la surface et la tension de surface devient un paramètre clé.

Pour la mise en forme de fondus, l'écoulement diphasique apparaît principalement lors de la coulée, entre le fondu et l'air environnant. De plus, la présence indésirable de bulles d'air lors de la solidification est aussi un exemple de surface libre, et ce sera un des points brièvement survolés dans ce mémoire. À notre connaissance, Mudryy et son équipe (Mudryy & Nastac, 2013) sont les seuls à avoir présenté un modèle numérique (2D) d'explosifs fondus où l'on peut voir une distribution de bulles d'air dans la pièce - la raison étant que la modélisation des surfaces libres est généralement complexe et est encore un domaine de recherche très actif. D'ailleurs, l'article de Mudryy fait malheureusement abstention de l'approche utilisée pour caractériser ce

comportement diphasique alors que d'autres auteurs préconisent un fondu sans bulles pour des fins de simplicité.

Pour rester dans le contexte des problèmes de solidification, Marin présenta, en 2006 lors de la conférence de COMSOL Multiphysics à Boston (Marin, 2006), ses travaux sur la simulation de la solidification d'une goutte d'aluminium liquide imprégnée sur une surface froide. La goutte se solidifie au contact de la surface alors que la partie liquide au-dessus est exposée à l'air. Cette frontière liquide-air constitue une surface libre (Figure 2.2).

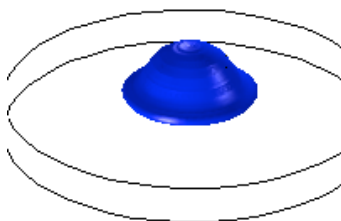


Figure 2.2 Gouttelette solidifiant sur une plaque froide ($t = 25\text{ms}$)

2.2.1 Les méthodes à grille fixe

Marin utilisa une approche eulérienne et par définition, une grille fixe dans le temps. À ce propos, en 2011, Kronbichler (Kronbichler, 2012), compare différentes méthodes numériques pour les écoulements polyphasiques, en privilégiant les méthodes FEM. Il note que pour le problème diphasique, un seul système d'équations pour le bilan de quantité de mouvement (Navier-Stokes) suffit à caractériser les deux fluides répartis dans des sous-domaines Ω_i avec $i = 1, 2$, avec comme solution $(\mathbf{v}, p)_i$ pour chacun des fluides.

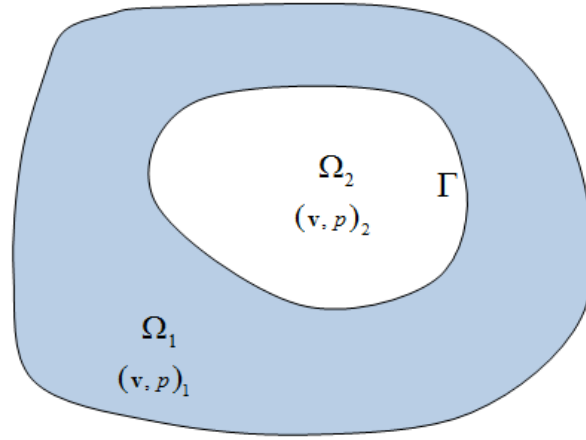


Figure 2.3 Domaine diphasique

Si cette approche est préconisée par la plupart des auteurs, la difficulté réside dans l'identification de l'interface, là où les forces et les propriétés des fluides reposent sur des conditions particulières. Dans le problème de la gouttelette de Marin, la tension de surface joue un rôle important à l'interface air - liquide. Cette interface $\Gamma = \Gamma(t)$ revient à traiter une surface libre évoluant selon la vitesse à la frontière $\mathbf{v}|_{\Gamma}$ (Kronbichler, 2012). Les conditions de sauts associées sont les suivantes (transfert de matière négligeable) :

$$[\mathbf{v}]_{\Gamma} = 0 \quad (2.1)$$

$$[-\mu(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \cdot \mathbf{n} + p\mathbf{n})]_{\Gamma} = \gamma \kappa \mathbf{n} \quad (2.2)$$

$$[-\mu(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \cdot \mathbf{n})]_{\Gamma} \cdot \mathbf{t} = 0 \quad (2.3)$$

Pour les quantités physiques qui diffèrent pour les deux fluides, il y a aussi un saut à l'interface. En prenant l'exemple de la masse volumique:

$$[\rho] = \rho_1 - \rho_2 \quad (2.4)$$

De plus, l'équation (2.2) revêt d'un intérêt particulier car c'est de là que découle le terme source représentant la tension de surface dans le bilan de quantité de mouvement (Kronbichler, 2012; Marin, 2006; Reddy & Gartling, 2001):

$$\mathbf{F}_{st} = \gamma \kappa \mathbf{n} \delta_{\Gamma} \quad (2.5)$$

Avec la fonction de Dirac δ_f concentrée à l'interface. Pour compléter la formulation d'un système diphasique, il faut donc représenter l'évolution transitoire de la surface libre et évaluer la tension de surface (Kronbichler, 2012; Marin, 2006). Les sous-sections suivantes offrent une brève revue des méthodes utilisées à ces fins.

2.2.1.1 Les méthodes de suivi du front mobile (*Front tracking*)

Ces méthodes reposent sur une description explicite de la surface et consistent à utiliser des marqueurs pour localiser l'interface; Peskin (Peskin, 1977) et Glimm (Glimm, Grove, Lendquist, McBryan, & Tryggvason, 1988) en ont d'ailleurs proposé plusieurs variantes. À mesure que l'écoulement déforme l'interface, les marqueurs sont redistribués sur la grille fixe du fluide. Une des stratégies populaires est la méthode MAC (*Marker-and-cell*), proposée par Harlow et Welch (Harlow & Welch, 1965) et considérée comme une méthode de suivi de volume. Le *Front Tracking* est néanmoins insuffisant et requiert des modifications afin de limiter les changements d'aire ou de volume du fluide dénués de sens physique (Kronbichler, 2012).

2.2.1.2 Les méthodes de capture du front mobile (*interface capturing*)

À l'opposé du suivi du front mobile, les méthodes de capture se basent sur une définition implicite de l'interface par le biais de quantités physiques comme le volume ou la concentration (Kronbichler, 2012). En remplaçant les particules de la méthode MAC par une fonction marqueur appropriée, on retrouve la méthode VOF (*Volume of Fluid*), très populaire en CFD. Il s'agit d'une approche discrète avec une variable qui stocke la fraction du premier fluide pour chaque cellule de la grille. Dès lors, l'interface est suivie en changeant la fraction volumique, selon le champ de vitesse et la composition des cellules voisines.

La méthode VOF est avantageuse pour conserver la masse et modéliser la coalescence ou la rupture de bulles (Kronbichler, 2012). Toutefois, elle est limitée à des problèmes spécifiques et manque de versatilité (Reddy & Gartling, 2001; Varela, 2008) et pour cette raison, deux méthodes de capture continues, les méthodes *Level set* et *Phase field* sont aujourd'hui très prisées (Reddy & Gartling, 2001).

2.2.1.3 La méthode Level-Set (LSM)

Les approches LSM ont vu le jour vers la fin des années 90 avec Sethian et Osher (Osher & Sethian, 1988) et sont depuis très prisées pour des cas d'écoulements diphasiques incompressibles. L'interface est définie implicitement comme la courbe de niveau nul d'une fonction scalaire ϕ définie sur Ω . En effet, ϕ est strictement négative pour le premier fluide, nulle à l'interface et enfin, strictement positive dans le deuxième fluide: il s'agit donc d'une fonction distance signée (Reddy & Gartling, 2001; Sussman, Smereka, & Osher, 1994). De plus, l'évolution de la surface libre (interface) est reflétée par le biais d'une équation d'advection (Marin, 2006; Varela, 2008), couplée aux équations de Navier-Stokes par la vitesse \mathbf{v} :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (2.6)$$

Cette équation hyperbolique est résolue à l'aide de schémas de différences, volumes ou éléments finis (nécessitent des méthodes stabilisées). Les méthodes LSM exigent également que le vecteur normal unitaire $\hat{\mathbf{n}}$ et la courbure κ de l'interface soient modifiées en fonction de ϕ .

Malheureusement, cette fonction ϕ standard agrmente la méthode de quelques désavantages. En effet, le champ de vitesse et certaines imprécisions du schéma numérique (Kronbichler, 2012) forcent la déformation de la fonction. Il est alors indispensable de réinitialiser la fonction dans le temps, ce qui contraint $|\nabla \phi| = 1$ (Russo & Smereka, 2000).

2.2.1.4 La méthode *phase field*

Cette méthode comprend aussi une fonction représentant l'interface et donne un sens physique au titre d'une "interface diffuse sur tout le domaine Ω " (Kronbichler, 2012). Elle tire son origine de l'hypothèse de van der Waals selon laquelle des fluides immiscibles se mélangent à l'échelle moléculaire; dès lors, le profil à l'interface est déduit à partir d'un bilan d'énergie entre le mouvement aléatoire et l'attraction moléculaire. Le résultat est une forme d'énergie libre du système, constitué principalement de l'énergie libre de mélange.

Par le biais d'une variable *phase field* ϕ définie comme étant $(1+\phi)/2$ et $(1-\phi)/2$ dans les deux fluides respectifs (choix subjectif), il est possible de formuler la densité de l'énergie de mélange de l'interface, une idée originale de Cahn et Hilliard en 1958 (Cahn & Hilliard, 1958) :

$$f_{\text{mix}}(\phi) = f_0(\phi) + \frac{l}{2} |\nabla \phi|^2 \quad (2.7)$$

Où:

$$f_0(\phi) = \frac{l}{4e^2} (\phi^2 - 1)^2 \quad (2.8)$$

Il est bon de noter que la variable ϕ est différente de celle des méthodes *level set* - elle représente ici la concentration. Ainsi, la fonction $f_{\text{mix}}(\phi)$ tend vers l'équilibre à $\phi = \pm 1$ (les composantes pures). l représente l'ampleur de l'énergie de mélange (en N) et e est une largeur capillaire représentant l'épaisseur de l'interface. Le système tend naturellement à minimiser son énergie libre de mélange et ce, par le processus suivant:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (M \nabla \psi) = \nabla \cdot \left(M l \nabla \left(\frac{\phi(\phi^2 - 1)}{e^2} - \nabla^2 \phi \right) \right) \quad (2.9)$$

Il s'agit de l'équation Cahn-Hilliard où ψ est le potentiel chimique et M représente un facteur de mobilité. Dans la méthode *Phase field*, le mouvement de l'interface se fait grâce à un terme de convection $\mathbf{v} \cdot \nabla \phi$ (Jacqmin, 1999) et l'on retrouve ainsi la forme modifiée de l'équation (2.9):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (M \nabla \psi) \quad (2.10)$$

Cette équation s'ajoute au système d'équations de Navier-Stokes pour un système polyphasique. Le paramètre Ml détermine le temps de relaxation de l'interface (Yue, Feng, Liu, & Shen, 2004) et est choisi selon les caractéristiques de l'écoulement. À ce sujet, Jacqmin (Jacqmin, 1999) stipule que l'écoulement peut affiner ou épaissir l'interface et que ceci doit être

évitée par une diffusion suffisamment élevée. Toutefois, une trop forte diffusion peut à l'inverse sur-amortir l'écoulement, d'où la nécessité de trouver un compromis pour le temps de relaxation.

Par ailleurs, si les deux méthodes continues présentées (LSM et *phase field*) offrent de nombreux avantages pour la représentation d'interface, elles peinent malheureusement à conserver la masse dans des simulations numériques.

2.2.2 Les méthodes à grille mobile

Contrairement aux méthodes à grille fixe, ces méthodes sont dites mobiles avec un maillage qui suit le mouvement du fluide (formulation Lagrangienne). Même si le maillage doit être mis à jour à chaque pas de temps, la méthode est plus économique en temps de calcul que les méthodes à grille fixe; en effet, le maillage est construit uniquement lors de l'initialisation du problème (Mosser, 2012). Parmi les variantes les plus populaires, on retrouve la méthode ALE.

ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian)

Il s'agit d'une méthode avec un maillage réactualisé à chaque pas de temps; c'est ainsi que l'on suit le déplacement de l'interface. Durant la mise à jour du maillage, il est d'abord nécessaire d'adapter ce dernier pour préserver la solution et ensuite de remailler afin de transférer la solution au nouveau maillage pour le pas de temps suivant (Heniche, 1995). Bien que connue pour être précise dans sa suivi de la surface libre, la méthode ALE est difficile à mettre en place pour des interfaces complexes (Mosser, 2012), notamment en 3D.

2.3 La modélisation du changement de phase

Les problèmes avec changement de phase revêtent une importance capitale dans les procédés de coulée. Du point de vue du transfert de chaleur, la mise en coulée implique à la fois de la conduction et de la convection. À cela, le changement de phase (solidification ou fusion) ajoute une difficulté supplémentaire. Au niveau de la modélisation, ce type de problème ressemble grandement aux problèmes à surface libre comme décrit à la section 2.2. En effet, il existe une délimitation physique entre la portion solidifiée et celle encore liquide que l'on nomme le front de solidification (Reddy & Gartling, 2001). Il s'agit donc d'une interface où des conditions de sauts apparaissent, notamment dans les propriétés physiques.

Il existe diverses approches pour formuler le problème de solidification et certaines hypothèses se recoupent chez nombre d'auteurs pour en faciliter la résolution. Parmi les travaux les plus notables, on retrouve ceux de Carslaw et Jaeger (Carslaw & Jaeger, 1959) pour décrire les conditions frontières appropriées afin de résoudre le bilan de chaleur sur tout le domaine. En général, dans les problèmes de solidification/fusion, la portion solide doit être considérée immobile (applicable au cas d'une pièce moulée) et de ce fait, la convection (d'un point de vue numérique) est nulle dans cette portion du domaine. Une autre hypothèse généralisée est que la température de solidification/fusion T_m est unique; c'est en effet le cas pour les substances pures mais en ce qui concerne la majorité des autres matériaux comme les explosifs, on observe plutôt un solidus et un liquidus distincts. La portion entre les deux est une région trouble, caractérisant un mélange solide-liquide.

Pour des fins de compréhension, nous considérons tout d'abord le cas d'une température T_m unique afin de présenter les conditions au front de solidification, telles qu'énoncées par Carslaw et Jaeger. Dans ce développement, les auteurs considèrent également que la variation de la masse volumique ρ est négligeable durant le changement de phase (Carslaw & Jaeger, 1959; Reddy & Gartling, 2001). Si l'on considère une masse de liquide se solidifiant au contact d'une paroi froide (Figure 2.4), le front de solidification est $x = X(t)$ (problème en 1D) et les conditions à cette interface liquide-solide sont:

$$\mathbf{v}|_X = 0 \quad (2.11)$$

$$T_s|_X = T_l|_X = T_m \quad (2.12)$$

$$k_s \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big|_X - k_l \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big|_X = \rho L \frac{dX}{dt} = \rho L \mathbf{v}^* \quad (2.13)$$

Où L est la chaleur latente, \mathbf{v}^* la vitesse du front de solidification alors que les indices s et l dénotent les phases solide et liquide, respectivement.

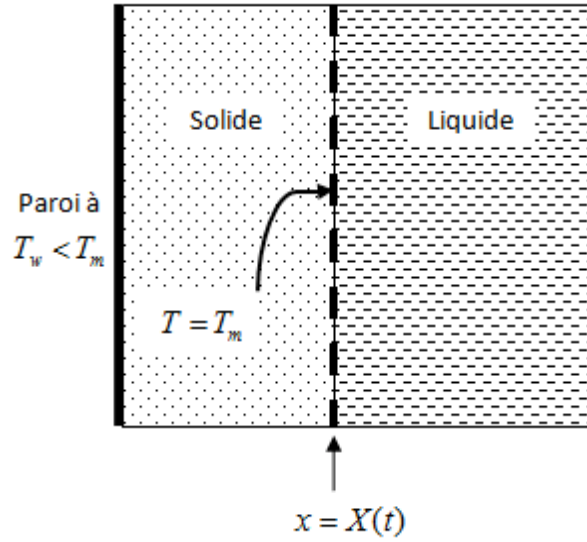


Figure 2.4 Portion de liquide en solidification

L'équation (2.13) est appelée l'équation d'énergie à l'interface (Jiji, 2009) et représente en soi une condition de saut entre les phases solide et liquide. D'ailleurs, c'est en reformulant cette condition de saut (Bonacini, Comini, Fasano, & Primicerio, 1973) que l'on aboutit à la très populaire méthode d'enthalpie décrite à la prochaine section.

2.3.1 La méthode de l'enthalpie

Le fondement de la méthode de l'enthalpie est d'utiliser une chaleur spécifique modifiée afin d'y incorporer l'effet de la chaleur latente L (2.14). Le but d'une telle démarche est de contourner la condition hautement non-linéaire (2.13) et de l'éliminer de la formulation du problème (Reddy & Gartling, 2001; Voller & Prakash, 1987).

En effet, la variation d'enthalpie du système est composée de la chaleur sensible (active durant le processus de refroidissement) et de la chaleur latente (variation enthalpique isotherme). En dérivant l'enthalpie H du système par rapport à la température, il est donc possible de formuler une nouvelle chaleur spécifique c_p^* , qui considère à la fois la contribution de la chaleur sensible et celle de la chaleur latente:

$$c_p^*(T) = \frac{dH}{dT} = c_p(T) + L\delta(T - T_m) \quad (2.14)$$

Où δ est la fonction Delta de Dirac. Cette chaleur spécifique modifiée c_p^* est ensuite utilisée pour représenter le pouvoir calorifique du matériau.

Par ailleurs, une des principales difficultés rencontrées avec ce genre d'approche (par grille fixe) pour les problèmes de solidification est de s'assurer que la vitesse est nulle dans la portion solidifiée. À ce sujet, plusieurs auteurs ont développé dans les années 80 des méthodes différentes pour assurer une vitesse nulle au solide. Ainsi, la Figure 2.5 schématise une de ces méthodes, soit celle de Gartling (Gartling, 1980) où le changement de la viscosité du matériau est utilisé pour représenter la solidification. Dans cette technique astucieuse, il est question d'exprimer la viscosité en fonction de ΔH , le contenu de chaleur latente moyen $0 \leq \Delta H \leq L$. À mesure que ΔH diminue en passant du liquide ($\Delta H = L$) au solide ($\Delta H = 0$), la viscosité augmente. Éventuellement, dans la phase solide, la viscosité possède une valeur très élevée, ce qui confère une vitesse quasi nulle à la portion solidifiée.

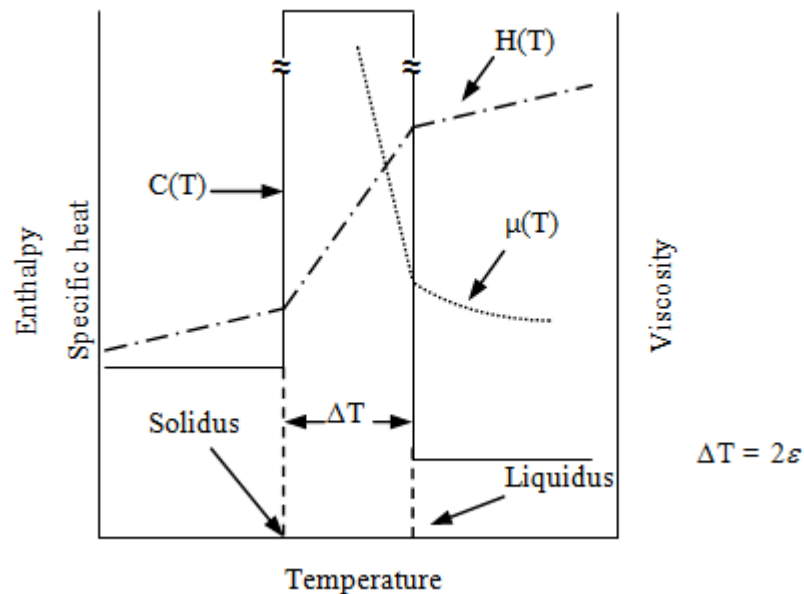


Figure 2.5 Définition des propriétés physiques du matériau pour le calcul du changement de phase (Reddy & Gartling, 2001)

2.3.2 Le modèle de solidification de Voller et Prakash

Une autre manière d'assurer une vitesse nulle dans la portion solide a été développée à la fin des années 80 dans le modèle de solidification développé par Voller et Prakash (Voller & Prakash, 1987) - un modèle qui deviendra par la suite très populaire. Leur approche repose essentiellement sur l'utilisation d'une fonction $F_s(T)$ qui représente la fraction solide à un nœud du domaine de calcul. Ainsi, pour un nœud du domaine où le matériau est complètement solidifié, la variable est égale à 1 alors que dans la phase liquide, $F_s(T) = 0$. Dans la région trouble entre le solidus et le liquidus, la fraction solide est fonction (généralement linéaire) de la température. Par la suite, cette fonction $F_s(T)$ vient moduler la chaleur latente ΔH pour que celle-ci soit libérée uniquement dans l'intervalle de température $\Delta T = 2\varepsilon$ (Figure 2.5) de la région trouble.

Pour ce qui est d'assurer une vitesse nulle dans la portion solidifiée, Voller et Prakash stipulent qu'en utilisant la théorie des milieux poreux, il est possible de suivre l'évolution du front de solidification à l'aide une fonction de porosité définie comme suit:

$$f_l = 1 - F_s(T) \quad (2.15)$$

La fraction liquide est employée ici pour représenter la porosité car l'on peut schématiser le mélange solide-liquide comme un milieu poreux avec le solide étant la matrice et le liquide, la partie poreuse. Voller et Prakash tirent ensuite de la loi de Darcy (voir développement (Voller & Prakash, 1987)) un nouveau terme source (2.16) très utile dans le bilan de quantité de mouvement pour amortir l'écoulement à des vitesses quasiment nulles.

$$\mathbf{F}_{\text{sol}} = -A\mathbf{v} \quad (2.16)$$

$$\text{Où } A = -C \frac{(1 - f_l)^2}{(f_l^3 + q)} \quad (2.17)$$

Les constantes C et q sont choisies afin de s'assurer que le terme source soit suffisamment grand pour imposer des vitesses nulles quand $f_l = 0$ (purement solide). Ainsi, on recherche généralement une valeur élevée pour C mais faible pour q . Toutefois, les auteurs de

cette méthode notent que la valeur de C ne doit pas non plus dépasser un certain seuil où il ne permettrait pas d'écoulement dans la région trouble $[T_m - \varepsilon, T_m + \varepsilon[$.

2.4 Le comportement thermomécanique dans les modèles de coulée.

Lors du refroidissement d'une pièce coulée, d'importantes contraintes thermiques peuvent être induites dans la pièce et le moule. Le *Continuous Casting Consortium* rattaché au département de génie mécanique de l'université d'Illinois est d'ailleurs très actif dans ce domaine dans lequel il œuvre depuis une vingtaine d'années. Le groupe dirigé par Brian G. Thomas se concentre principalement sur les procédés de coulée en continu et ceux de l'acier. Comme l'ont noté Thomas et ses collaborateurs au fil des ans (Bellet & Thomas, 2007; Koric & Thomas, 2006), les groupes de recherche à travers le monde s'intéressent de plus en plus au couplage thermomécanique dans les procédés de coulée car, cela a un impact direct sur la qualité du produit final. En effet, de nombreux défauts de moulage tels que les criques de retrait, la ségrégation des phases, la distorsion, etc. (Bellet & Thomas, 2007) sont dus aux contraintes résiduelles développées durant le processus de refroidissement. La présente section traite de la modélisation de ces contraintes thermiques et comment ce concept est intégré dans des modèles couplés. Il y est également question de l'adhérence aux parois mais de façon très sommaire. En effet, il s'agit d'un aspect encore très peu étudié dû à la difficulté de mesurer l'adhérence aux parois ou d'y tenir compte dans un modèle numérique de mise en coulée.

2.4.1 Les notions générales

Les travaux sur les contraintes thermiques ont longtemps suscité beaucoup d'intérêts; il faut remonter jusqu'en 1835 pour répertorier le premier article sur les contraintes thermiques et la thermoélasticité, écrit par J.-M.-C Duhamel de l'École Polytechnique de Paris (Hetnarski & Eslami, 2009); aujourd'hui, ces principes sont bien compris et l'on peut même s'avancer et décrire la théorie entourant les contraintes thermiques comme étant simple, dans ce sens où elle est uniquement reliée à l'évolution de la température. En effet, la dilatation thermique (ou contraction dans le cas d'un refroidissement) est liée à la température T par le biais du coefficient de dilatation thermique b_s , une propriété physique (considérée isotrope ici pour le

solide) qui dépend des forces de liaison entre les composantes du système. On obtient ainsi la composante du tenseur de déformation due au changement de température :

$$\epsilon^T = b_s (T - T_{ref}) \mathbf{I} \quad (2.18)$$

Où T_{ref} est une température de référence pour laquelle on considère qu'il n'y a aucune déformation et donc, aucune contrainte thermique. Cette relation est d'autant plus importante car elle implique que le changement de température conduit uniquement à un changement de volume ici, sans aucun cisaillement (Boley & Weiner, 1960; Hetnarski & Eslami, 2009).

Par ailleurs, de nombreux chercheurs déplorent souvent la difficulté d'obtenir l'information sur les propriétés viscoélastiques/plastiques des matériaux énergétiques. Une des hypothèses pour contourner ce problème est de considérer le matériau énergétique comme étant thermoélastique et isotrope (Mudryy & Nastac, 2013; Sun et al., 2005). Dans ce cas particulier, la déformation totale comprend seulement deux composantes: la déformation thermique ϵ_{ij}^T et la déformation élastique ϵ_{ij}^e , celle-ci étant déduite de la loi de Hooke (2.19):

$$\epsilon_{ij}^e = \frac{1}{2G} (s_{ij} - \frac{n}{1+n} s_{kk} \delta_{ij}) \quad (2.19)$$

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^e + \epsilon_{ij}^T \quad (2.20)$$

Avec ϵ_{ij} représentant le tenseur de déformation totale. En combinant les termes (2.18) et (2.19) dans l'équation (2.20), on retrouve la loi constitutive de la thermoélasticité linéaire:

$$s_{ij} = 2G [\epsilon_{ij} + \frac{n}{1-2n} (\epsilon_{kk} - \frac{1+n}{n} b_s (T - T_{ref})) \delta_{ij}] \quad (2.21)$$

2.4.2 Les difficultés numériques de la modélisation des contraintes thermiques

Le couplage thermomécanique est encore aujourd'hui très difficile à mettre en œuvre dans les simulations numériques. Ceci est principalement dû à la nature hautement non-linéaire du problème et à l'apparition de gradients de température très abrupts lors de la phase de solidification. C'est d'ailleurs ces gradients qui sont la cause primaire du débalancement des déformations et donc, de l'apparition de contraintes (Bellet & Thomas, 2007). Comme établi dans

la section 2.1, la dérivée en temps de la température \mathcal{T} joue aussi un rôle important dans le couplage thermomécanique et il est souvent difficile d'obtenir un profil de \mathcal{T} sans oscillations.

À ce propos, Aberg, Vynnycky et Fredriksson ont présenté un article de conférence (Aberg, Vynnycky, & Fredriksson, 2005) sur la modélisation des contraintes thermiques dans un cas de procédé coulée en continu, applicable aux métaux comme le cuivre et les aciers. Outre la problématique de conditions frontières spéciales à adopter pour schématiser le procédé continu (particulièrement pour la formulation du problème d'équilibre des forces), les auteurs notent qu'en utilisant la méthode de l'enthalpie, même un maillage très fin n'est pas suffisant pour dissiper les oscillations de \mathcal{T} . À la place, ils utilisent une méthode ALE pour suivre l'évolution du front de solidification. Il est toutefois bon de rappeler que la méthode ALE s'applique généralement pour des topologies simples et que dès la géométrie se complexifie, l'approche d'Aberg et de ses collègues risquerait de ne plus être aussi avantageuse.

Par ailleurs, de nombreux auteurs notent qu'il est souvent nécessaire d'avoir recours à des algorithmes sur mesure afin de trouver les solutions appropriées pour les contraintes thermiques et les déformations - par exemple, le groupe de Thomas est connu pour avoir développé certains algorithmes à l'interne (Koric & Thomas, 2006) qui sont spécialement dévoués aux problèmes aux conditions limites de nature thermomécanique. De plus, indépendamment de l'approche utilisée, la non-linéarité inhérente aux problèmes thermomécaniques implique que la simulation numérique reste un défi du point de vue de la capacité mémoire des ordinateurs. En essayant de considérer les propriétés viscoélastiques ou la plasticité, la non-linéarité est amplifiée et le problème d'autant plus complexe. À ce jour et à notre connaissance, la plupart des travaux à ce sujet traitent de problèmes 1D ou 2D, même si progressivement, comme le soulignent Aberg et ses collaborateurs, la symétrie des géométries de procédés de coulée permettent une analyse en 2D axisymétrique ou en 3D pour des géométries très simples (Aberg et al., 2005).

2.4.3 Le contact et l'adhérence aux parois

2.4.3.1 Le contact mécanique entre deux surfaces

La nature du contact entre deux surfaces est un problème appartenant à la mécanique des milieux continus et dépend principalement de trois facteurs : le contact, l'adhérence et le

frottement (Talon & Curnier, 2003). Adams et Nosonovsky (Adams & Nosonovsky, 2000) soulignent aussi, dans un article sur la modélisation des forces entre deux corps en contact, que d'autres facteurs peuvent jouer un rôle dans la formulation du contact; les auteurs mentionnent à ce sujet la plasticité et les termes d'ordre supérieur pour décrire la topographie locale de la surface. En effet, l'état de surface est un élément très important pour la modélisation d'un contact - par exemple, le contact entre deux surfaces rugueuses se fait sur plusieurs petites zones appelées *aspérités* (Adams & Nosonovsky, 2000; Talon & Curnier, 2003).

Parmi ceux qui se sont consacrés à cette partie de la mécanique des milieux continus, Hertz fut le premier, au 19^{ième} siècle, a proposé une solution au problème de contact simple (sans adhérence): le *contact de Hertz*, qui est encore aujourd'hui très populaire. Cependant, seule la pression normale y est considérée (contact unilatéral) et le frottement n'y est pas inclut, ce qui n'est pas toujours correct. Les hypothèses utilisées de la théorie Hertzienne (Talon & Curnier, 2003) sont :

1. La surface de contact est elliptique.
2. Chaque corps est approximé par un demi-espace élastique chargé sur le plan elliptique de la surface de contact (Figure 2.6).
3. Les dimensions de la surface de contact doivent être suffisamment petites par rapport aux dimensions de chaque objet et aux rayons de courbure des surfaces respectives.
4. Les déformations sont suffisamment petites pour utiliser un modèle d'élasticité linéaire.
5. Le contact est sans frottement afin que seule une pression normale soit transmise.

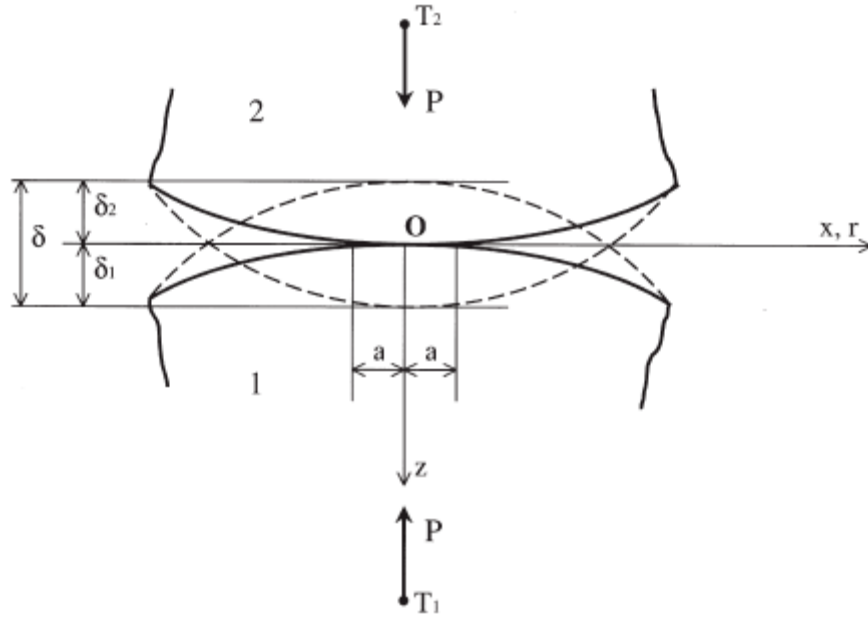


Figure 2.6 Contact Hertzien entre deux corps élastiques (Adams & Nosonovsky, 2000)

Au fil des ans, la formulation du contact unilatéral a été étoffée. Moreau et par la suite Curnier (Bussetta, Marceau, & Ponthot, 2012; Talon & Curnier, 2003), stipulent que le contact unilatéral est en fait dicté par une condition d'impénétrabilité (2.22), une condition de répulsion statique (2.23) et une condition de complémentarité entre énergie et travail (2.24) :

$$g_n \geq 0 \quad (2.22)$$

$$t_n \leq 0 \quad (2.23)$$

$$g_n t_n = 0 \quad (2.24)$$

Où g_n représente la distance entre les deux surfaces et t_n est la pression de contact normale. La physique de contact ajoute donc encore plus de non-linéarité aux problèmes thermomécaniques et dans la plupart des cas, pour la traiter numériquement, il est nécessaire d'avoir recours à une méthode de pénalisation (Bussetta et al., 2012). Ou alors, on peut avoir recours à la méthode du Lagrangien augmenté (Bussetta et al., 2012; Fortin & Garon, 2011): il s'agit d'une méthode découlant de la pénalisation et qui est aujourd'hui très populaire parmi les auteurs pour aider à la convergence des différents problèmes.

Toutefois, il existe aussi une autre alternative intéressante à la pénalisation qui est décrite dans les travaux de Sun, Annapragada, Garimella et Singh (Sun et al., 2007). Il s'agit de la possibilité de séparer le calcul des contraintes pour chaque domaine (le moule et l'explosif), éliminant ainsi le besoin d'avoir recours à un algorithme de contact. En effet, s'il y a une grande disparité dans les coefficients de dilatation thermique des deux matériaux en contact (comme dans le domaine de la coulée d'explosif), il peut être très difficile de simuler numériquement le contact. Cependant, on peut sans doute imaginer que le défi dans ce genre d'approche réside dans la manière d'assurer la continuité du champs de contraintes et de déformations à travers l'interface entre le moule et le matériau énergétique.

2.4.3.2 Les modèles d'adhérence

Un des éléments importants du phénomène de contact (négligée dans la méthode de Sun et aussi dans l'approche classique) est l'adhérence entre les surfaces. Contrairement au contact Hertzien qui est d'origine purement mécanique, l'adhérence est due aux forces d'attraction entre les molécules de deux surfaces en contact et elle apporte donc une contribution de nature chimique. Comparé au frottement, c'est un aspect plus délicat à implémenter selon la littérature courante. En effet, il est nécessaire de développer un modèle qui peut représenter adéquatement l'adhérence dans la zone de contact et ceci pourrait se faire par le biais d'un modèle de cohésion, communément appelée *cohesive zone model* (CZM) (Talon & Curnier, 2003; Volokh, 2004). Certes, les forces de cohésion sont réservées aux molécules d'une même substance alors que les forces adhésives s'appliquent aux forces d'attraction intermoléculaires comme les forces Van der Waals, dipôle-dipôle, etc. (Wu, 1982); toutefois, cela n'empêche pas l'adoption de modèle CZM pour l'adhérence car il s'agit dans les deux cas de représenter l'étendue d'une force intermoléculaire par le biais d'une fonction mathématique bien précise.

Concrètement, un CZM dépend de deux paramètres objectifs : d'abord, une contrainte à l'arrachement s_0 qui représente la contrainte maximale à laquelle l'interface peut résister avant que les surfaces ne se décolent et ensuite, un deuxième paramètre - la distance critique δ_c qui définit la distance séparant les deux surfaces où l'on considère qu'il n'y a plus de contact ou d'adhérence (Aksak, Hui, & Sitti, 2010; Talon & Curnier, 2003; Volokh, 2004). Par exemple, le modèle Dugdale-Barenblatt (DB) (Barenblatt, 1962; Dugdale, 1960) illustrée à la Figure 2.7 ci-

dessous illustre un CZM utilisé pour la simulation numérique de l'adhérence entre une fibre élastique et un substrat donné:

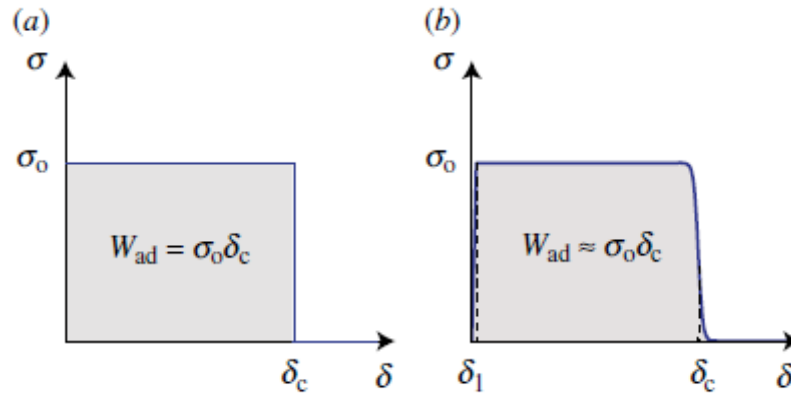


Figure 2.7 (a) Le modèle DB classique (b) modèle modifié pour la simulation numérique (Aksak et al., 2010)

En résumé, la revue littérature présentée dans ce chapitre permet de cibler les outils disponibles et nécessaires à la modélisation de la mise en œuvre de matériaux énergétiques. Le cycle de refroidissement, en particulier, nécessite le couplage de plusieurs phénomènes physiques comme le notent Cruchaga et ses collaborateurs. Parmi ces phénomènes, la technique employée pour le changement de phase reste au cœur de toute l'architecture de l'outil numérique à développer. En effet, à chaque nœud de calcul, l'information sur la température régit non seulement l'écoulement du fluide (s'il y a lieu) mais également les contraintes thermiques et les modifications à apporter pour modéliser le retrait. Les méthodes présentées à la section 2.3 rendent possible ces différents couplages. Enfin, il sera utile d'emprunter, à la mécanique de contact, la technique de modèle de cohésion présentée à la section 2.4 afin de peaufiner une meilleure méthode numérique autour de la nature du contact entre un projectile et le matériau énergétique qu'il contient.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE

Ce chapitre traite de l'ensemble de la démarche qui a été nécessaire pour entreprendre ce projet. Elle regroupe notamment le développement mathématique, les hypothèses posées et les autres supports nécessaires à la réalisation du projet de maîtrise.

3.1 Approche de modélisation

Le travail de modélisation repose essentiellement sur trois grands piliers, soient: les entrants au modèle, la représentation des phénomènes physiques impliquées et la concordance des résultats numériques. Le cœur du présent projet est le développement d'un modèle de simulation du cycle de refroidissement d'un obus militaire à l'aide du logiciel COMSOL Multiphysics. Pour remplir pleinement cet objectif, il était dans un premier temps nécessaire d'avoir un modèle fonctionnel pour une géométrie plus simple qu'un projectile. Ainsi, comme établi avec le partenaire industriel, un modèle de simulation traitant du processus de solidification et du refroidissement d'une pièce cylindrique a d'abord été étudié (Figure 3.1). Ce modèle inclue également l'analyse des contraintes thermiques, en lien avec les objectifs de recherche du projet. De plus, l'approche numérique à la solidification dans le cadre de ce travail a été vérifiée en comparant le modèle avec les résultats d'un modèle de solidification de référence.

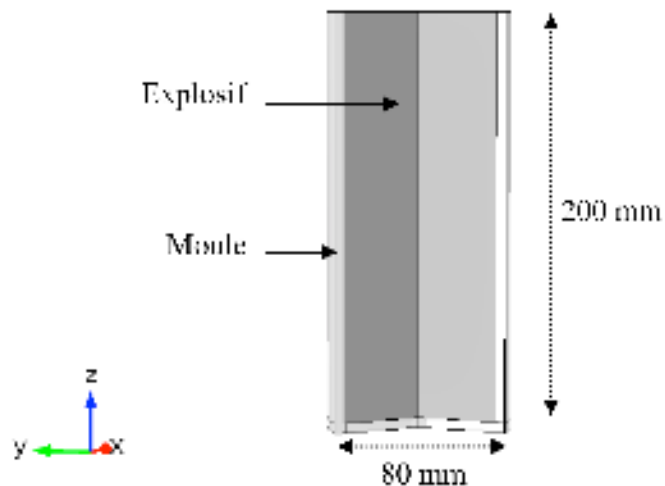


Figure 3.1 Pièce cylindrique(Weiner & Boley, 1963)

Plus particulièrement, le travail de Weiner et Boley (Weiner & Boley, 1963), reconnu comme étant un classique dans la résolution des problèmes thermomécaniques, a été choisi pour effectuer les tests de comparaison du modèle de solidification. Il s'agit du cas d'une plaque semi-infinie (en métal) qui est maintenue légèrement au-dessus de sa température de fusion (Figure 3.2). Au temps $t = 0$, l'extrémité gauche de la plaque est refroidie, initiant la solidification du métal liquide. La solution de Neumann, qui traite de la portion thermique du problème revient donc à une solution en 1D du profil de température, la difficulté principale se situant à l'interface solide-liquide comme expliquée à section 2.3.

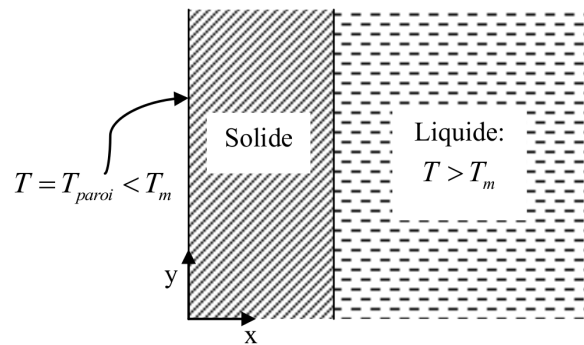


Figure 3.2 Plaque en solidification (adaptée de (Weiner & Boley, 1963))

Ce problème test très populaire a été choisi car il existe une solution semi-analytique à ce type de problème de solidification. Celle-ci a été développée, dans le cadre de ce projet, dans un script MATLAB présenté à l'annexe A. Les propriétés du matériau test utilisé sont compilées dans le Tableau 3.1 ci-dessous. Par la suite, la solution semi-analytique a été comparée avec les résultats obtenus avec ceux d'une simulation par éléments finis du problème de solidification sur COMSOL Multiphysics. Ces résultats sont également présentés à l'annexe A.

Tableau 3.1 Propriétés du matériau test et autres données pour le problème de vérification

Masse volumique, ρ (kg/m ³)	7500
Conductivité thermique, k (W/(m·K))	33
Chaleur spécifique, c_p (J/kg/K)	661
Température du solidus, $T_{m,s}$ (°C)	1494.35
Température du liquidus, $T_{m,l}$ (°C)	1494.45
Chaleur latente, L (J/kg)	272000
Température de la paroi, T_w (°C)	1000

La construction du modèle du cylindre simple et la comparaison avec un problème test sont utiles pour vérifier l'approche numérique et s'inscrivent dans un cadre de vérification et de validation (V & V) du travail. En effet, la technique du V & V peut être pratique en simulation numérique (D. Vidal, communication personnelle, novembre 2014) pour s'assurer qu'on construit le bon modèle d'un point de vue phénoménologique (vérification) et que celui-ci a une bonne représentativité de la réalité (validation), souvent par le biais de comparaisons expérimentales. C'est à ce stade-ci que la modélisation d'une vraie géométrie d'obus a été utilisée - il s'agit d'un calibre de 105 mm, tel que schématisé à la Figure 3.3.

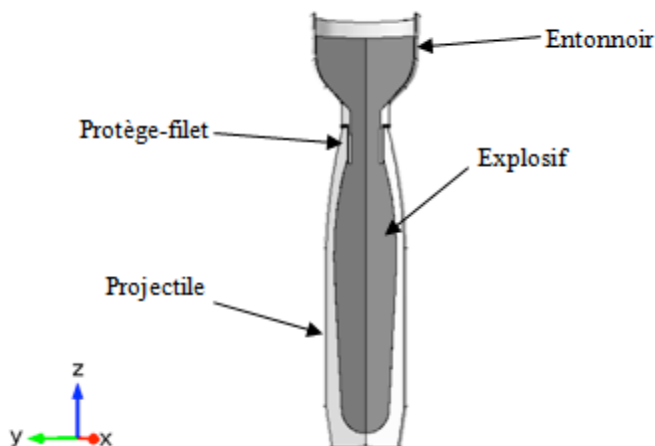


Figure 3.3 Calibre de 105 mm

3.2 Construction d'un modèle FTM (Fluide-Thermique-Mécanique)

Dans le cadre de ce projet de recherche, le matériau énergétique utilisée est la Composition B mais l'outil numérique développé n'est pas limité pas à celle-ci, en autant que les propriétés physiques nécessaires au modèle soient disponibles. La Composition B est un mélange de 59.5 % massique de cyclotriméthylène-trinitamine (RDX), de 39.5 % massique de trinitrotoluène (TNT) et d'une cire (1 %) (Gibbs & Popolato, 1980). Le RDX solide est utilisé comme liant et à une forte concentration de particules, le mélange peut être supposé newtonien et isotrope. C'est une hypothèse déjà utilisée par le passé par Mudryy et Nastac (Mudryy & Nastac, 2013) pour un autre matériau énergétique, le IMX-101, dans lequel un seul des constituants, soit

le 2,4 dinitroanisole (DNAN) subit un changement de phase alors que les autres composants demeurent solides au sein du mélange.

Comme mentionné à la section 3.1, les entrants au modèle sont extrêmement importants. Outre la géométrie utilisée, les propriétés thermomécaniques et les conditions de refroidissement doivent être scrupuleusement respectées afin d'avoir un modèle complet et suffisamment représentatif. Le Tableau 3.2 énumère les principaux éléments qui ont dû être considérés lors de la construction des modèles de simulation (pour le cylindre et le calibre de 105 mm). Il est à noter que les propriétés thermiques ont été soit fournies, soit validées avec General Dynamics-OTS Canada. Les conditions de refroidissement ont également été procurées auprès du partenaire industriel, sauf dans le cadre du modèle de vérification, soit le modèle cylindrique. En effet, dans le cas de ce dernier, le moule est considéré, dès le départ, entièrement immergé dans un bain d'eau à 40 °C, à l'exception du haut qui est exposé à l'air ambiant (25 °C).

Tableau 3.2 Principaux entrants au modèle de simulation

Propriétés physiques	Conditions de refroidissement
Masse volumique	Température initiale (moule, explosif, entonnoir)
Chaleur latente	Température de l'air ambiant
Chaleur spécifique	Présence d'éléments chauffants, s'il y a lieu: sonde thermique, anneaux chauffants
Conductivité thermique	Température de coulée
Température de solidification	Température du bassin d'eau, s'il y a lieu
Coefficient de dilatation thermique	Profondeur du bassin d'eau, s'il y a lieu
Coefficient de Poisson	
Module de Young	

Afin de modéliser le changement de phase, la méthode de l'enthalpie est utilisée, avec l'approche de Voller et Prakash dans une méthode à grille fixe (section 2.3.2) pour imiter la solidification et assurer une vitesse quasi nulle dans la phase solide. De plus, au lieu d'utiliser la formulation en termes d'enthalpies, une chaleur spécifique modifiée pour inclure la chaleur latente est employée à la place (3.1). C'est sous cette forme que la chaleur spécifique est ensuite utilisée dans le bilan de chaleur (3.4).

$$c_p^*(T) = c_p(T) + L\delta_{2\varepsilon}(T - T_m) \quad (3.1)$$

Par ailleurs, le Tableau 3.3 illustre les propriétés physiques utilisées dans le cadre des simulations pour le cylindre et le projectile de 105 mm. À ce sujet, le changement de propriétés physiques lors de la solidification, notamment le changement de densité, est extrêmement délicat à traiter. Cependant, ce sont les forces de flottabilité qui régissent le mouvement de fluide (convection naturelle) dans ces procédés de coulée. Elles sont représentées par le terme gravitationnel dans l'équation de quantité de mouvement (3.3) et ainsi, il est possible d'utiliser une approximation de Boussinesq (Bergman, Incropera, & Lavine, 2011) pour prendre en compte le changement de densité en fonction du changement de température.

Tableau 3.3 Propriétés thermomécaniques de la Composition B

Masse volumique, ρ (kg/m ³)	1640
Viscosité dynamique, μ (Pa·s) à : 93 °C	0.8
: 80 °C	1.2
Chaleur spécifique (solide), c_{ps} (J/kg/K)	923
Chaleur spécifique (liquide), c_{pl} (J/kg/K)	1600
Coefficient de dilatation thermique (solide), b_s (1/K)	5.46×10^{-5}
Coefficient de dilatation thermique (liquide), b_l (1/K)	6.19×10^{-4}
Conductivité thermique, k (W/(m·K))	0.258
Latent Heat, L (J/kg)	33447
Température de fusion, T_m (K)	353.15
Coefficient de Poisson, n	0.36
Module de Young, E (GPa)	1.1

Le transfert de chaleur et l'écoulement sont entièrement couplés et les lois de conservation nécessaires à leur modélisation sont les suivantes, avec les modules associés dans COMSOL Multiphysics entre parenthèses :

- Loi de conservation de la masse (*Laminar Flow*):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.2)$$

- Loi de conservation de la quantité de mouvement (*Laminar Flow*):

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \cdot b_l (T - T_m) \mathbf{g} + \frac{(1 - f_l)^2}{f_l^3 + q} C \mathbf{v} \quad (3.3)$$

- Loi de conservation de l'énergie/bilan de chaleur (*Heat transfer in fluids*):

$$\rho c_p^* \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (3.4)$$

D'un point de vue mécanique, le changement de la phase liquide à la phase solide de la Composition B doit refléter le passage d'une phase mobile à une phase immobile. L'approche de Voller et Prakash (Voller & Prakash, 1987) comprend l'utilisation d'une fonction définie par parties (appelé fraction solide (3.5)) autour du point de fusion T_m dans l'intervalle entre le solidus et le liquidus. L'hypothèse selon laquelle la Composition B posséderait une région trouble est tout à fait applicable car il s'agit d'un mélange et non d'une substance pure, ce qui réfute, selon toute vraisemblance, la contre-hypothèse d'une température unique de solidification.

$$F_s(T) = \begin{cases} 1, & T < T_m - \varepsilon \\ \frac{T_m + \varepsilon - T}{2\varepsilon}, & T_m - \varepsilon \leq T < T_m + \varepsilon \\ 0, & T \geq T_m + \varepsilon \end{cases} \quad (3.5)$$

La fraction $F_s(T)$ permet donc de suivre, dans la limite de la zone trouble 2ε , le front de solidification. S'ensuit la relation (2.15) qui se retrouve dans le terme source de Darcy $\frac{(1-f_l)^2}{f_l^3 + q} C$ dans l'équation de quantité de mouvement (3.3). C'est dans la phase solide ($T < T_m - \varepsilon$) que ce terme prend toute son importance et domine les autres termes du bilan de quantité de mouvement, ayant pour résultats une vitesse amortie et quasi nulle. Pour les besoins du présent projet de recherche, $C = 10^5$ et $q = 10^{-3}$ après que plusieurs combinaisons furent essayées en utilisant l'outil de balayage paramétrique de COMSOL Multiphysics.

Hormis le changement de phase, la deuxième composante d'intérêt au modèle est le développement des contraintes thermiques lors du refroidissement de la pièce solidifiée. En l'absence de propriétés viscoélastiques disponibles pour la Composition B, le matériau énergétique est considéré comme un matériau purement thermoélastique avec un module de Young qui dépend de la température de solidification. En effet, il est supposé qu'il n'y a pas de contraintes dans la phase liquide et que c'est uniquement dans la phase solide que se développent

des contraintes thermiques. Dans ce cas, le module de Young est remplacé par une valeur inférieure de plusieurs ordres de grandeur à celle de la Tableau 3.3 afin de conférer un état à contraintes pratiquement nulles à la phase liquide. La loi constitutive de la thermoélasticité linéaire (2.21) est ensuite utilisée dans l'équation de Navier (3.6) pour la résolution des contraintes et des déformations thermiques résultant du refroidissement de la pièce (cylindre et calibre de 105 mm). Il est évident que l'information sur la température qui résulte du bilan de chaleur (3.4) est essentielle pour assurer ce couplage thermomécanique. L'état de référence choisi pour le calcul de la dilatation thermique est la phase liquide au temps initial.

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \frac{E}{2(1+n)} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{E}{2(1+n)(1-2n)} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \frac{Eb_s}{1-2n} \nabla T + \mathbf{F} \quad (3.6)$$

Il est également utile de mentionner que le module *solid mechanics* de COMSOL Multiphysics est utilisé pour traiter du calcul des contraintes et des déplacements. Il contient une fonctionnalité intégrée de maillage mobile afin d'évaluer les contraintes et les déformations dans un référentiel Lagrangien et prendre ainsi en considération la contraction de la pièce et des autres composants du montage de coulée.

3.3 Ajout de l'adhérence et traitement de la séparation aux parois

Un des apports clés et novateurs de ce projet de recherche est la considération de l'adhérence dans une simulation numérique pour matériaux énergétiques coulés. L'adhérence est intégrée au modèle FTM par le biais d'un CZM (Voir section 2.4.3.2) qui a été personnalisé au cas du présent projet. Le CZM est dans les faits une fonction définie par parties et qui est assimilable à un ressort imaginaire qui retient la surface du moule à celui de la pièce: au delà d'une déformation maximale u_{peak} , le ressort se déforme irréversiblement jusqu'au point de rupture u_{break} . Dans ce dernier scénario, les deux surfaces ne sont plus en contact et une séparation est formée. Le modèle de CZM présenté est sous forme de déplacement imposé (*displacement controlled*), en opposition au mode de contrainte imposée (*load controlled*) qui pourrait engendrer des problèmes de convergence dues à « l'apparition d'une rigidité négative quand la force d'adhésion diminue en fonction du déplacement » (COMSOL, 2012).

$$F_{adh} = \begin{cases} K_s u, & u < 0 \text{ Pu}_{\max} \leq u_{peak} \\ (1-d)K_s u, & u_{peak} \leq u_{\max} < u_{break} \\ 0, & u_{\max} \geq u_{break} \end{cases} \quad (3.7)$$

Avec

$$d = \frac{u_{break}(u_{\max} - u_{peak})}{u_{\max}(u_{break} - u_{peak})} \quad (3.8)$$

Où K_s est un facteur de rigidité numérique, u_{peak} et u_{break} sont obtenues à partir de résultats expérimentaux (voir section 3.4) et d est un paramètre qui mesure l'affaiblissement progressif de la force d'adhérence. Lors du refroidissement des matériaux énergétiques coulés, il est parfois possible d'observer une séparation entre la pièce solidifiée et le moule/projectile en métal (souvent de l'acier) (Sun et al., 2007). Il était donc nécessaire d'inclure cette possibilité dans le modèle de simulation. L'algorithme utilisé pour traiter l'apparition d'une éventuelle séparation est le suivant:

1. Au temps t , le déplacement maximal u_{\max} est évalué.
2. Si le point de rupture n'est pas atteint, la force d'adhésion est calculée et la prochaine itération en temps $t + \Delta t$ peut prendre place.
3. Au cas contraire, si le point de rupture est dépassée $u_{\max} \geq u_{break}$, il y a une séparation g_n qui est formée et qui équivaut à la différence entre les déplacements de la pièce et du projectile/moule. La prochaine itération, a ensuite lieu.

Due à la séparation, le transfert thermique dans le système est modifié car cette séparation introduit une nouvelle forme de résistance thermique située entre le projectile et le matériau énergétique. Ceci est pris en compte dans le modèle en incluant la résistance due à l'interstice par une relation appropriée (3.9), avec h_{gap} en $W/(m^2 \cdot K)$. Celle-ci découle du fait que l'on peut négliger 1) la résistance de contact car les surfaces sont considérées lisses; 2) il n'y a pas de transfert par convection car l'interstice est composé d'air au repos) et; 3) le transfert par rayonnement est négligeable par rapport à celui par conduction. La référence de 0.001 mm est

déterminée de façon arbitraire pour marquer la limite sous laquelle l'on considère que les surfaces sont encore en contact tout en évitant une division par zéro.

$$h_{\text{gap}} = \begin{cases} \frac{k_{\text{air}}}{1 \times 10^{-6}}, & g_n < 0.001 \text{ mm} \\ \frac{k_{\text{air}}}{g_n}, & g_n \geq 0.001 \text{ mm} \end{cases} \quad (3.9)$$

3.4 Composantes expérimentales du projet de recherche

Dans le cadre de ce travail de recherche, il y a deux principaux apports d'un point de vue expérimental. Tout d'abord, des tests de traction personnalisés ont été mis sur pied afin de mesurer l'adhérence aux parois du projectile. En effet, il s'agit d'une mesure difficile à obtenir car elle a une valeur très faible (General Dynamics, communication personnelle, 20 juin 2014). Pour ces tests de traction, des mâchoires spécialement dédiées à la géométrie de la base d'un projectile régulier ont été fabriquées par General Dynamics. Le schéma du montage est illustré à la Figure 3.4 et les résultats des tests entrepris aux locaux de General Dynamics (présentés à l'annexe B) sont débattus à la section 5.4.

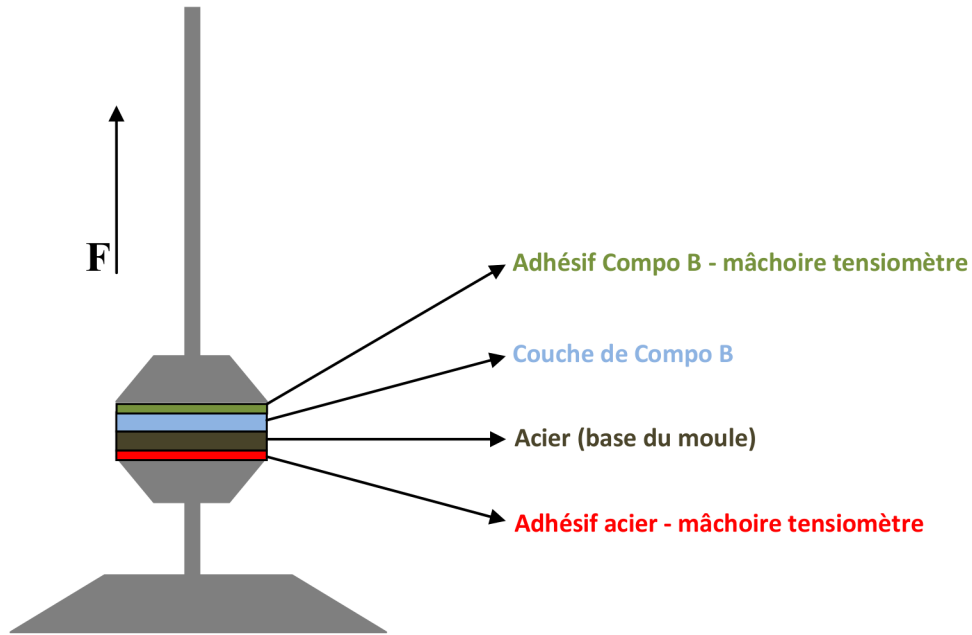


Figure 3.4 Montage pour test de traction

Dans un deuxième temps, des courbes de températures appartenant à une expérience antérieure de coulée en laboratoire de Composition B ont été fournies par General Dynamics afin de valider les résultats numériques du modèle de calibre de 105 mm. Par la même occasion, des courbes de températures représentant les conditions environnantes, autrement dit, la température du bassin d'eau, de l'air ambiant, etc. étaient aussi disponibles. Ces courbes-ci étaient particulièrement importantes car elles ont servi de conditions frontières (et initiales) dans les simulations numériques.

3.5 Étude sur un modèle diphasique incluant des bulles d'air

Dans un souci d'augmenter les capacités du modèle à inclure encore plus de phénomènes physiques, un modèle en 2D (et non 2D axisymétrique) d'un plan d'un cylindre a été bâti et dans lequel des cercles aléatoires ont été disposées (Figure 3.5). Ces cercles représentent des bulles d'air dans un plan vertical et le but de cette simulation a été d'étudier un écoulement diphasique avant la solidification complète de la pièce. En pratique, la présence de bulles d'air dans le fondu est possible et celles-ci peuvent se retrouver emprisonnées dans la pièce solidifiée, devenant ainsi des sites préférentielles pour des zones de concentration de contraintes et de défauts dans la pièce. Un algorithme a été mis sur pied à l'aide de MATLAB (script reproduit à l'annexe C) pour générer des cercles d'air en 2D (une version 3D est aussi disponible pour des bulles en 3D). Un deuxième code MATLAB a ensuite été produit (également à l'annexe C) et il permet d'écrire directement la géométrie des bulles générées selon la syntaxe API compatible à COMSOL, ce qui permet d'importer facilement l'ensemble des cercles/bulles en tant que géométrie dans COMSOL.

Par ailleurs, la méthode *phase field* a été employée afin de simuler l'écoulement diphasique non-isotherme avant solidification complète de la pièce. Quatre paramètres étaient jugés susceptibles d'influencer le fonctionnement de la simulation et surtout, d'assurer une bonne représentativité: la largeur capillaire ϵ , le facteur de mobilité M , la tension de surface γ et la viscosité m_{\max} (l'approche de Gartling a été utilisée pour imiter la solidification). À travers un plan expérimental à 4 facteurs (Latin Hypercube) et 40 essais, différentes combinaisons de ces paramètres ont été testées. La variable de réponse (ou variable d'intérêt) était l'évolution de la masse du système car comme mentionné à la section 2.2.1.4, il s'agit là de la grande faiblesse des méthodes de capture continues telles que la méthode *Phase field*.

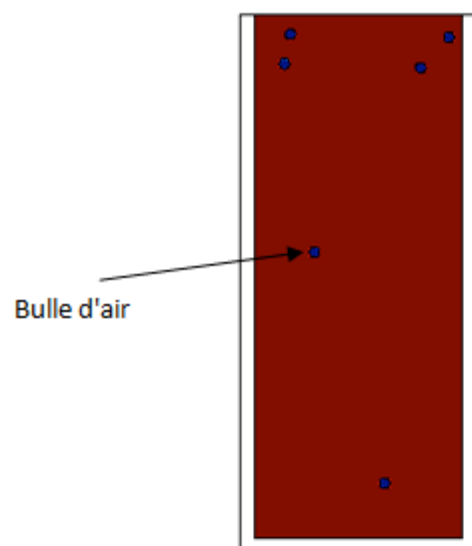


Figure 3.5 Plan vertical d'un cylindre avec des "bulles d'air"

CHAPITRE 4 ARTICLE 1: NUMERICAL MODELING OF THE COOLING CYCLE AND ASSOCIATED THERMAL STRESSES IN A MELT EXPLOSIVE CHARGE

Par Warren Sanhye, Charles Dubois, Isabelle Laroche et Pierre Pelletier

Soumis à la revue American Institute of Chemical Engineers Journal (AIChE Journal) de Wiley en novembre 2015

Cet article, soumis en novembre 2015, est au cœur de la contribution de cette recherche. Les divers outils mathématiques parcourus dans la revue de littérature et ce, dans des domaines variés, sont mis en œuvre dans cet article qui traite de la construction du modèle de simulation pour un obus de 105 mm. Des éléments complexes du coulage tels que le retrait, les contraintes résiduelles et l'adhérence aux parois sont inclus dans ce travail. Il est également question des bonnes pratiques à adopter pour un refroidissement contrôlé. En particulier, les avantages liés à des techniques comme celle de la sonde thermique sont démontrés numériquement.

Abstract

A comprehensive simulation tool is developed to describe and optimize the cooling cycle in the melt-casting of Composition B. It comprises a multiphysics approach tackling heat, mass and momentum transfers involved in the casting process. The highly non-linear solidification step and development of thermal stresses are included. A V & V (Verification and Validation) approach was adopted whereby the model was verified against a benchmark problem and tested with a simple cylindrical geometry. Then, the approach was applied to a 105 mm caliber artillery shell and simulation results were in close agreement with experimental measurements. The model is equipped with a CZM function to account for adhesion between the solidified cast and the mold. During cooling, separation is possible and the size and location of gaps, depending on shrinkage and adhesion, are successfully emulated. The importance of controlled solidification is pointed out, especially regarding steep temperature gradients within the shell.

Keywords: Melt casting, Solidification, Explosives, Adhesion modeling, Multiphysics

4.1 Introduction

The industrial production of energetic materials, including their use to fill projectiles or containers, has drawn much attention since the 20th century and nowadays, fusible explosives are widely used in military and civilian applications. Recently, novel explosives have emerged to answer needs for safer and greener materials, particularly in the area of explosive actuated safety devices and detonating projectiles. These charges are produced by a typical melt-casting process involving a metal mold in which the hot explosive melt is poured before the cooling process takes place and a solidified explosive is formed. This translates as a quite straight-forward process and therefore, melt-casting is seen as a more economical approach than mechanical pressing for most applications (Lamy-Bracq & Coulouarn, 2009). A closer look into the specifics of melt-casting reveals that it involves many interrelated physical phenomena such as heat transfer, fluid flow, solid mechanics and rheology. It is thus very important to control the cooling conditions during casting as they have a direct effect on the quality of the final product, which is very important to ensure safety if the filled object is submitted to high acceleration. Several defects in the final shell such as void formation, air entrapment and cracks are often associated with inadequate cooling profiles.

The numerical modeling of casting processes implies a multiphysics approach where the aforementioned phenomena have to be carefully coupled to best depict the real process. The most critical step of the numerical work is known to be the phase change from the melt to the solid phase due to the high non-linearity of the problem brought along by abrupt changes in material properties at the solidification front. Many authors have suggested ways to model phase change processes, among which the enthalpy based fixed grid method by Voller and Prakash (Voller & Prakash, 1987) remains the most popular. Marin has used the method to simulate the solidification of a liquid aluminum droplet impinging on a cold surface, whereby the heat capacity of aluminum is modified to include the latent heat of fusion at the solidus-liquidus (slurry region) temperatures (Marin, 2006). The approach has also successfully been applied in the field of explosive melt-casting through the works of Sun et al. (Sun et al., 2005), Mudryy and Nastac (Mudryy & Nastac, 2013) and Coulouarn et al. (Coulouarn et al., 2013). At the core of the method is the expression for the enthalpy of the melt which is modulated by a solid fraction

function. The former is then evaluated according to the temperature calculated at a node (4.1). If the temperature is below the solidus, the enthalpy is that of the solid phase while above the liquidus, it corresponds to the liquid phase. The interval 2ε between the two phases represents a mushy zone where the effects of latent heat are accounted for (Reddy & Gartling, 2001).

$$F_s(T) = \begin{cases} 1, & T < T_m - \varepsilon \\ \frac{T_m + \varepsilon - T}{2\varepsilon}, & T_m - \varepsilon \leq T < T_m + \varepsilon \\ 0, & T \geq T_m + \varepsilon \end{cases} \quad (4.1)$$

The second part of the solidification modeling concerns the necessary condition for zero velocity as the material solidifies. This is one of the main difficulties in fixed grid methodologies and once again, different alternatives have been provided. Gartling (Gartling, 1980) used a viscosity step function in which the viscosity increases to a large value below melting point, thereby imitating solid behavior. In their modified enthalpy method, Voller and Prakash proposed the use of an artificial solidification source term $\frac{(1-f_l)^2}{f_l^3 + q}C$ in the momentum (Navier-Stokes) equation, where f_l is the liquid fraction ($f_l(T) = 1 - F_s(T)$) and C and q are constants. When the temperature is below the solidus, the solidification term severely damps the velocity resulting from the momentum equation to simulate the phase change and solid behavior.

Since casting processes involve both liquid and solid phases, heat loss is governed not only by conduction but also by convection. In fact, prior to solidification, the temperature gradient leads to density changes in the melt and convection cells are formed, which may have an effect on the overall cooling of the material. For energetic materials casting, Sun notes that most explosive melts are organic compounds or mixtures of these compounds with a very high viscosity and high Prandtl Number (between 1000 and 2000)(Sun et al., 2005). Hence, it is often assumed that conduction remains the principal mode of heat transfer involved in melt-casting and few works in the literature treat of convection effects in melt-casting. It remains of utmost importance to characterize properly the heat transfer mechanisms during the cooling process since they have a marked influence on the quality of the product. Through their work on a

continuous metal casting application, Aberg, Vynnycky and Fredriksson (Aberg et al., 2005) found that the thermal stresses which are induced during cooling are responsible for half-way cracks and other defects in the solidified shell. Works by Wang et al.(Wang, Xie, Sun, & Huang, 2011) suggest, without thorough analysis, that air entrapment or void formation due to shrinkage affects the product quality, with respect to its combustion/detonation in the case of energetic materials. A good review on thermal stresses development and modeling, especially in steel casting, is provided by Bellet and Thomas(Bellet & Thomas, 2007). Sun et al.(Sun et al., 2007) investigated the development of residual stresses in a PAX (Picatinny Arsenal eXplosive) melt-casting simulation by considering the material as thermoelastic. The same approach was reported by Mudryy and Nastac(Mudryy & Nastac, 2013) to successfully work in the case of IMX-101 (Insensitive Munitions eXplosives).

Sun et al.(Sun et al., 2007) also reported the possibility of gap formation at the interface between the mold and the solidified energetic material. This is mainly due to volume shrinkage but in practice, there are other factors that can affect the size and the location of these air gaps. For example, gravity can reinforce contact at some points (such as the base) and conversely, favour separation at others. High friction and good adhesion between the contact surfaces can also decrease the risks of separation. In any case, it is necessary to control the size of the gap for two main reasons. First, if the contact between the mold and the solidified material is too strong, there is almost no gap formation and under induced thermal stresses, this may result in unwanted cracks or fracture. Secondly, even though a smooth coming off of the cast material is often desired, a too large gap can, on the opposite, be a concern for safe functioning of the projectile when submitted to high acceleration.

From a numerical point of view, contact modeling is very well documented, albeit in other applications than energetic materials and explosive charges. Prior to the formation of gaps, there are three main factors (Talon & Curnier, 2003) that usually characterize the contact between two random surfaces: contact pressure, friction and adhesion. The first two are purely mechanical considerations and have been extensively studied by Hertz (Hertz, 1882), while adhesion, on the other hand, relates to the chemical surface interactions between the contact surfaces. Contact problems usually add more non-linearity to thermo-mechanical modeling and hence, special penalty methods have to be designed in order to obtain a solution(Bussetta et al., 2012; Fortin &

Garon, 2011). The task is even more complex for explosives casting since the difference in thermal coefficients between the steel components and the energetic material makes it very difficult to ensure continuity in the stress and displacement fields. An interesting alternative implemented by Sun et al. (Sun et al., 2007) involves by-passing a formal contact algorithm and calculating the stresses separately in the mold and the casting. In this case, the size of the gap is simply the difference between the displacement of the mold surface and that of the cast.

To our knowledge, there is no reporting of adhesion modeling in the literature for energetic materials casting. This is often due to difficulties to characterize the surface interactions and to obtain reliable data. Strictly speaking, the absence of adhesion to the formulation of contact between two elastic bodies constitutes an oversimplification of the contact model, especially for low loads; this was demonstrated by Johnson et al. in 1971, compiled in what is now a classical work (Johnson, Kendall, & Roberts, 1971) which exposed the contradictions to the Hertzian theory owing to the absence of adhesion. In that same study, the authors presented a formal model, best known as the JKR (Johnson-Kendall-Roberts) model, to integrate adhesion to Hertzian contact. Several other models also exist, among which the CZM (Cohesive Zone Model) is a popular example borrowed from the field of fracture mechanics (Barenblatt, 1962). Talon and Curnier (Talon & Curnier, 2003) proposed a CZM coupled to contact and even friction. Their method required using either a tailored *penalty* or an *Augmented Lagrangian* method for solution purposes. Aksak et al. (Aksak et al., 2010) used a modified Dugdale-Barenblatt (DB) model (a CZM), to simulate the adhesion of soft elastic fibres to a rigid substrate.

The present work is focused on the numerical modeling of the casting of a Composition B explosive formulation. Our integrated model emphasizes on the importance of controlled solidification through probe heating, especially with respect to the development of potential defects and excessive residual stresses in the solidified charge. In particular, we propose an innovative approach to simulate the adhesion to the projectile walls and to predict the probable size and location of gaps formed under solidification and cooling. The fluid-thermo-mechanical (FTM) model was first tested with a simple cylindrical geometry (Figure 4.1) before more complex and realistic simulations were performed for a 105 mm caliber (Figure 4.2). In addition, we adopted a verification and validation (V & V) approach during the course of this work: we

first verified the modeling methodology against a benchmark test problem and secondly, we used experimental data from an actual 105 mm caliber casting to validate our simulation results.

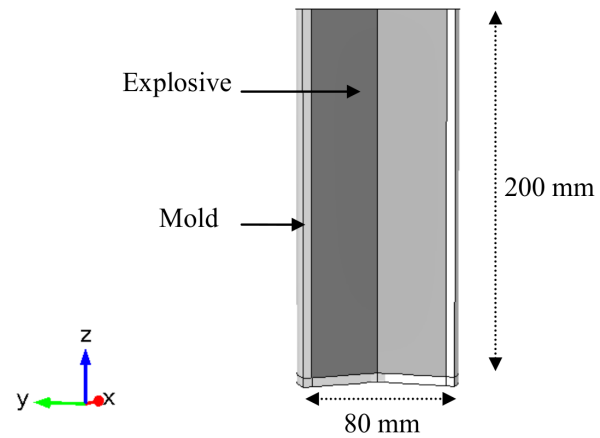


Figure 4.1 Cylinder geometry

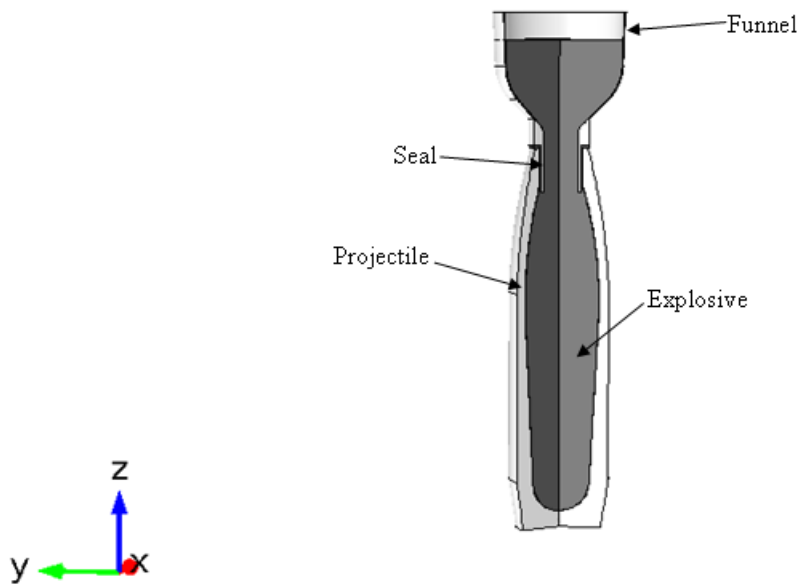


Figure 4.2 Generic 105 mm caliber shell

4.2 Methodology

4.2.1 Numerical model

A similar modeling approach is used for both the cylinder and generic casting, first because only Composition B melt is used for the two castings and secondly, the physics is essentially the same, except for topological considerations (the 105 mm projectile requires extra care for meshing and boundary layers, for example). Composition B is a mixture of 59.5 wt% cyclotrimethylene-trinitamine (RDX) and 39.5 wt% trinitrotoluene (TNT) with a wax desensitizer (1 wt %)(Gibbs & Popolato, 1980). The RDX is used as an energetic filler and at a high content of these solid particles, the explosive melt is considered to exhibit isotropic and Newtonian behavior. The thermo-physical properties used in our investigation are listed in Table 4.1. Average values are shown for the material properties, while in the numerical model, we make use of the Boussinesq approximation to take into account the variation of density with temperature. This is a fairly valid hypothesis since it is the buoyancy forces, represented by the gravity body force term in the momentum equation that drives fluid motion in such casting processes.

Table 4.1 Thermal and physical properties of the Composition B melt used

Density, ρ (kg/m ³)	1640
Dynamic viscosity, μ (Pa·s)	0.8
Specific heat (solid), c_{ps} (J/kg/K)	923
Specific heat (liquid), c_{pl} (J/kg/K)	1600
Thermal expansion coefficient (solid), b_s (1/K)	5.46×10^{-5}
Thermal expansion coefficient (liquid), b_l (1/K)	6.19×10^{-4}
Thermal conductivity, k (W/(m·K))	0.258
Latent Heat, (J/kg)	33447
Solid to slurry temperature, T_m (K)	353.15
Poisson's ratio, n	0.36
Young's modulus, E (GPa)	1.1

Table 4.2 Thermo-mechanical properties of the mold and funnel

	Mold	Funnel
Density, ρ (kg/m ³)	7850	7877
Specific heat, c_p (J/kg/K)	475	366

Thermal expansion coefficient, α (1/K)	1.23×10^{-5}	1.11×10^{-5}
Thermal conductivity, k (W/(m·K))	15.0	16.0
Young's modulus, E (GPa)	205	236
Poisson's ratio, n	0.28	0.30

In the absence of visco-plastic properties, the melt is modeled as a single material obeying the law of linear thermoelasticity (4.2). Moreover, a temperature-dependent Young's modulus (Sun et al., 2007) is used such that the molten state is stress-free (Figure 4.3). In fact, thermal stresses are induced in the casting only during cooling and the reference state is the initial melt temperature.

$$s_{ij} = 2G[\epsilon_{ij} + \frac{n}{1-2n}(\epsilon_{kk} - \frac{1+n}{n}b_s(T-T_{ref}))\delta_{ij}] \quad (4.2)$$

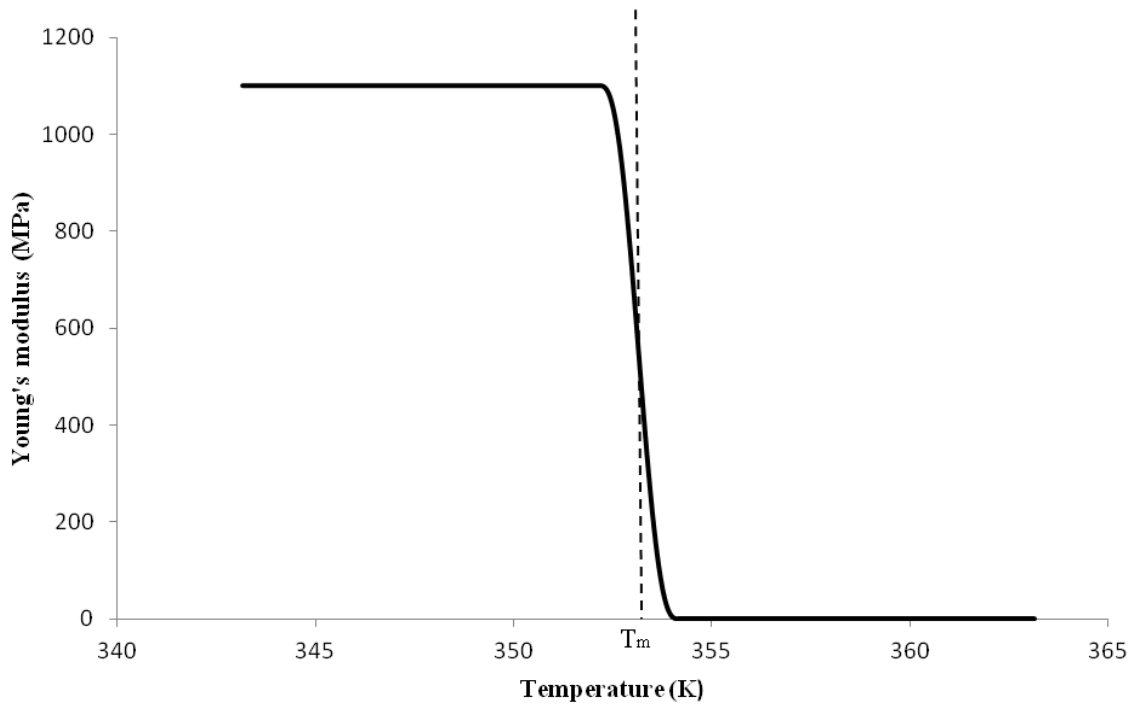


Figure 4.3 Temperature-dependent Young's modulus for Composition B melt

The governing equations of conservation of mass (4.3) and momentum (4.4) for the explosive melt represent those of an incompressible, isotropic and Newtonian material. Heat transfer and thermally induced stresses are computed for both the casting domain and the mold,

with the temperature information from the relevant heat equation (4.5) being fed into the equilibrium (Navier) equation of motion (4.6) to evaluate the induced displacements and stresses. By considering the material as thermoelastic, the effects due to thermal gradient can be considered as a body force in the Navier equation formulation (Hetnarski & Eslami, 2009). This technique consolidates the fact that the thermal gradient is the actual driving force for the presence of thermal stresses.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (4.3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \cdot b_l (T - T_m) \mathbf{g} + \frac{(1 - f_l)^2}{f_l^3 + q} C \mathbf{v} \quad (4.4)$$

$$\rho c_p^* \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (4.5)$$

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \frac{E}{2(1+n)} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{E}{2(1+n)(1-2n)} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) - \frac{E b_s}{1-2n} \nabla T + \mathbf{F} \quad (4.6)$$

Modifications were made to the Voller and Prakash solidification approach by integrating the latent heat through a customized specific heat capacity (4.7) instead of modifying the enthalpy of the melt as in the original method:

$$c_p^*(T) = c_p(T) + L \delta_{2e}(T - T_m) \quad (4.7)$$

Where L is the latent heat, $2e$ is the temperature interval between the liquidus and solidus and T_m is the melting point of the energetic material. Extra care is needed regarding the choice of $2e$ as it is usually small compared to the total temperature variation in the casting problem and can thus lead to difficulties for numerical time integration. On the other hand, it should not be too small, such that the temperature evaluated at a particular node jumps over the interval due to the integration time step, with the information due to latent heat being lost. In COMSOL, we used a parametric procedure whereby the half-interval temperature e was ramped

from a larger value down to the actual value so as to benefit from the integrated parametric solver to approach the desired solution.

4.2.2 Gap considerations

The appearance of a gap between the solidified material and the mold is common in casting processes and is due to a mismatch in the extent of contraction during cooling between the energetic material and the mold. As can be observed in Table 4.1 and Table 4.2, Composition B has a higher thermal expansion coefficient (5.46×10^{-5} 1/K) compared to the mold (1.23×10^{-5} 1/K) and funnel (1.11×10^{-5} 1/K); it is thus expected that the more pronounced shrinkage of the casting leads to its separation from the steel parts of the projectile.

In our model, we also include the adhesive contact between the projectile and the shell by using an appropriate cohesive zone model (CZM). The latter, initially intended for cohesive forces between molecules, can also be tailored to represent the adhesive strength in a contact area since in both cases, the end result is to represent an attractive force by a precise mathematical function (4.8). The CZM is user-defined and can be visualized as an imaginary spring holding the two surfaces together. Beyond a peak value, the deformation increases irreversibly until the breaking point is reached and the surfaces have detached. It is also important to notice that the adhesion modeling here is displacement controlled; since, a load-controlled approach could bring up convergence issues when the energy released during separation is too large.

$$F_{adh} = \begin{cases} K_s u, & u < 0 \text{ or } u_{\max} \leq u_{peak} \\ (1-d)K_s u, & u_{peak} \leq u_{\max} < u_{break} \\ 0, & u_{\max} \geq u_{break} \end{cases} \quad (4.8)$$

Where K_s represents the penalty stiffness factor (analogous to a numerical "spring" stiffness in this case) and d is the damage evolution parameter :

$$d = \frac{u_{break}(u_{\max} - u_{peak})}{u_{\max}(u_{break} - u_{peak})} \quad (4.9)$$

The formation of the gap is therefore directly linked to the temperature which dictates the induced displacements in the casting. Conversely, the air gap formed introduces a new form of

thermal resistance to the overall heat transfer in the casting process. The relevant equivalent thermal circuit is shown in Figure 4.4 with g_n representing the size of the gap. A few assumptions were made to facilitate modeling in the scope of this work:

1. The contact resistance r_{contact} is omitted because the surfaces of the projectile and energetic material are considered perfectly smooth i.e. with no asperities.
2. Heat transfer due to convection in the gap is neglected since the air within the gap can be considered as still air.
3. The contribution of radiation to the overall heat transfer is also negligible compared to conduction and convection.

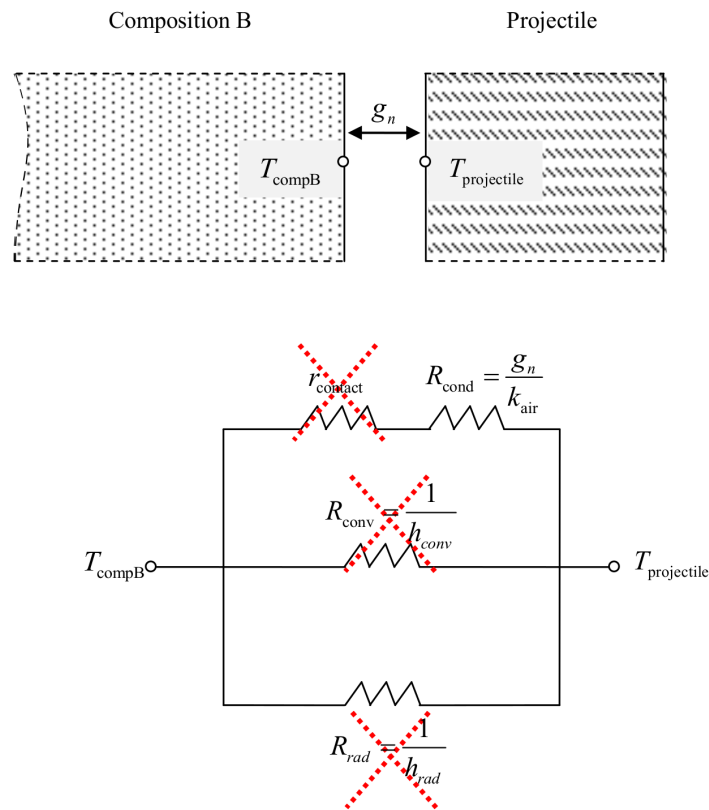


Figure 4.4 Equivalent thermal circuit for gap conductance

Thus, the only important resistance is the resistance to conduction R_{cond} , which may be rewritten to obtain the formal description of the gap conductance h_{gap} . A user-defined function (4.10) ensures that this gap conductance is high enough and fixed (to avoid numerical instabilities) below a threshold value of 0.001 mm. This is the point where we consider separation to affect the overall heat transfer thereafter. In fact, below 0.001 mm, the gap conductance is at its highest value and does not impede the heat transfer, compared to the low conductivity in Composition B, for instance. This is consistent with a no gap situation, while for $g_n \geq 0.001$ mm, the gap thermal resistance increases with increasing gap size.

$$h_{\text{gap}} = \begin{cases} \frac{k_{\text{air}}}{1 \times 10^{-6}}, & g_n < 0.001 \text{ mm} \\ \frac{k_{\text{air}}}{g_n}, & g_n \geq 0.001 \text{ mm} \end{cases} \quad (4.10)$$

4.2.3 Overall coupling methodology

COMSOL Multiphysics alone was used to address both the solidification process and the development of thermal stresses during cooling. Prior to solidification, the melt is subjected to a temperature gradient and the arising flow field is solved in a fully coupled manner with the temperature field. The temperature calculated at each node is then used to evaluate the resulting thermal expansion. Consequently, the stress and displacement fields can be solved separately for the projectile, funnel and energetic material. The gap size is determined from the resulting displacements, followed by the new gap conductance. These two new pieces of information are then looped for the next iteration of melt convection and heat transfer.

In evaluating the gap, it is essential to keep track of the maximum displacement u_{max} at each node for each time step. This is necessary to obtain the accurate adhesive strength because the damage parameter depends on u_{max} . In COMSOL Multiphysics, we added an extra degree of freedom (DOF) at the adhesive boundaries to track the value of the maximum displacement. The new DOF was embodied in a customized algebraic equation which compared the maximum displacement at a certain time with the one at the previous time step, such that if the current displacement is larger, u_{max} was updated.

The overall FTM problem is two-way coupled, with some steps sequentially solved. In the first place, the solver settings are fully coupled for melt convection and solidification. Then, most of the steps for the thermal stresses solution (within the same time step) are sequential: the temperature and its gradient are used to evaluate the displacements, which are in turn used to calculate the gap size and conductance. Because the increase in gap size influences the overall heat transfer, there is actually two-way coupling between the thermal analysis and mechanical analysis. (Figure 4.5 gives an overview of how the different physics are coupled in this work).

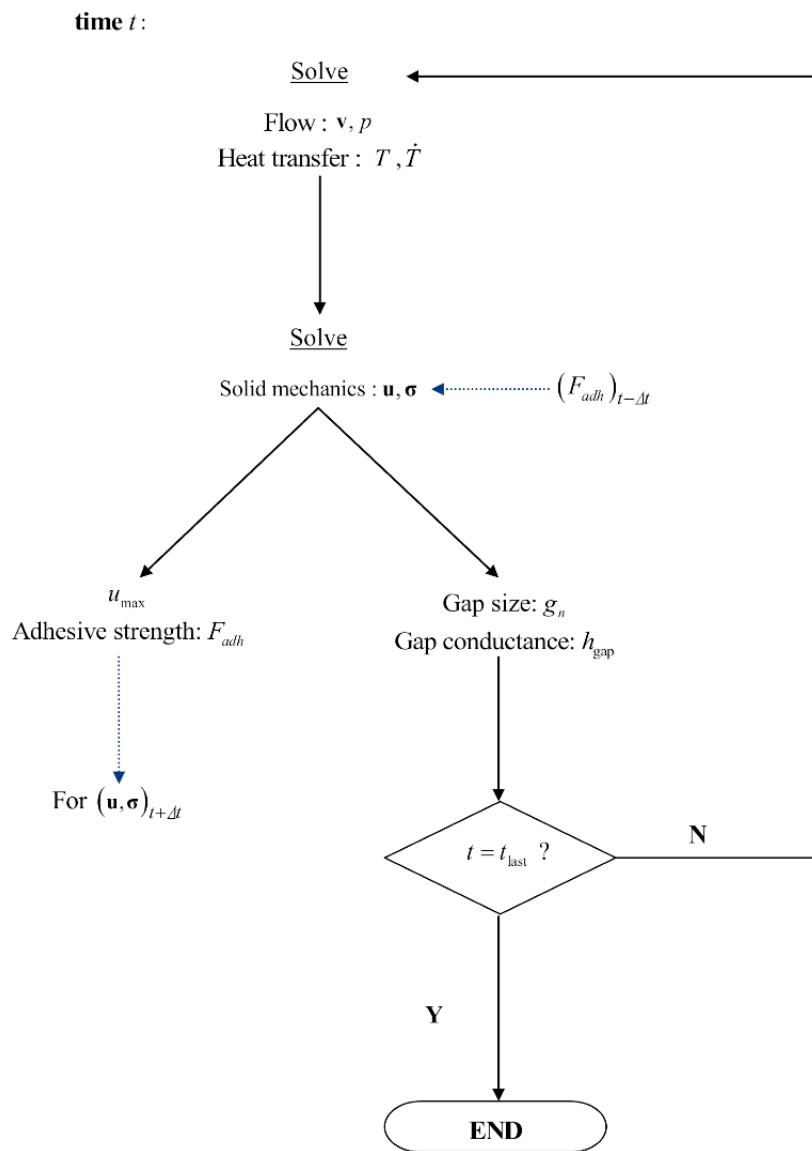


Figure 4.5 Coupling pathway

4.2.4 Mesh refinement study - convergence analysis

A mesh refinement study was conducted to ensure that the numerical model is grid independent. For example, in the case of the cylinder geometry, the mesh is a combination of rectangular grids (Figure 4.6) and a refinement factor rf was defined such that the larger rf , the finer the mesh (Table 4.3). We chose and monitored different output parameters at specific times and locations as the mesh size was varied. Conveniently, the finest mesh was assumed to be closest to the real solution and all other solutions for the different mesh sizes were compared to this "best approximation".

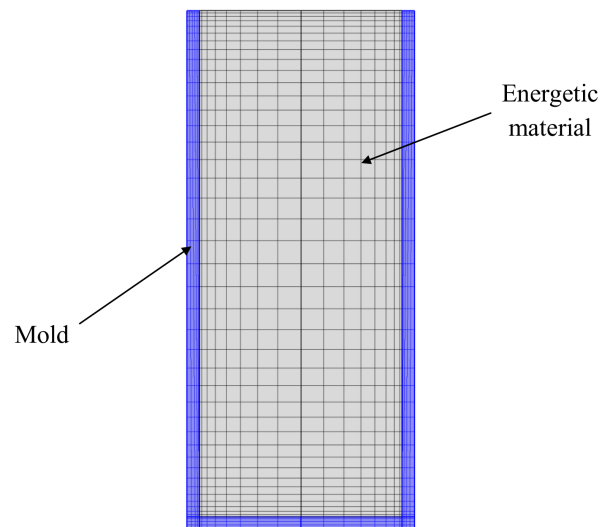


Figure 4.6 Mesh used for the cylindrical geometry

Table 4.3 Grid levels used for mesh refinement study

Levels	Coarse					Fine
rf	1	2	3	4	5	6
Shell	8 X 40	16 X 80	24 X 120	32 X 160	40 X 200	48 X 240
Mold bottom	8 X 4	16 X 8	24 X 12	32 X 16	40 X 20	48 X 24
Mold side	4 X 4	8 X 8	12 X 12	16 X 16	20 X 20	24 X 24
Mold corner	4 X 4	8 X 8	12 X 12	16 X 16	20 X 20	24 X 24

4.3 Results & discussion

The present section is divided into two main components: Numerical modeling of the casting in a cylinder and secondly, simulation and experimental results for a generic 105 mm caliber casting. Solution times varied according to both the nature and size of the problems. For example, the computational times for parametric sweeping or mesh refinement investigations ranged from a couple of hours to two or three days; similarly, simulations requiring solid mechanics computation were more demanding due to strong geometric non-linearity and mesh reconstruction. All the simulations were run on 12-core computers with ample memory capabilities to take advantage of the full range of post-processing tools with COMSOL.

4.3.1 Cylinder geometry testing

Prior to the numerical investigation of the more realistic 105 mm caliber, the cylinder casting model was set up to study the various physics couplings and to infer preliminary observations about the phase change and cooling process from a simple geometry. It comprises a 2D-axis symmetric model of a steel mold surrounding a Composition B core, the latter initially maintained a few degrees above its melting point. The mold is considered to be immersed in a water bath whilst the top of the setup is exposed to ambient air. In addition, as shown in Figure 4.7, the bottom surface of the mold is assumed to be insulated such that the whole material loses heat through the sides and top only. The numerical model is equipped with point probes over the computational domain in order to be able to produce temperature curves at specific locations, as would be the case with actual thermocouples placed on the experimental setup.

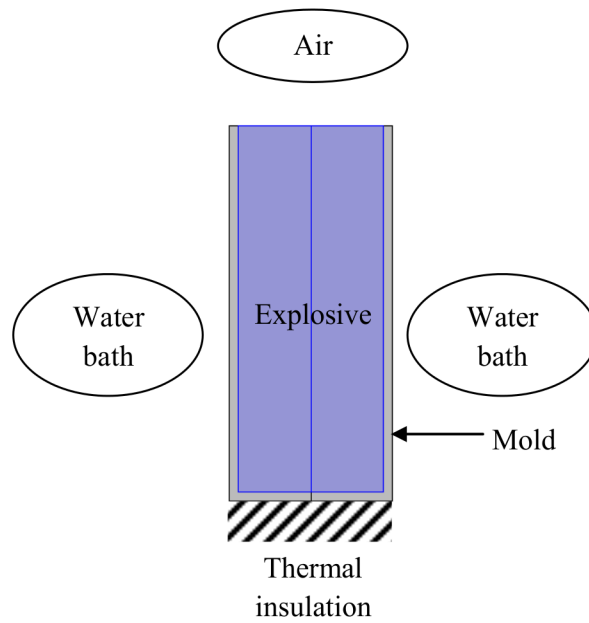


Figure 4.7 Schematic view of the surrounding environment of the cylindrical casting

4.3.1.1 Phase change and non-isothermal flow analysis

In this simplified case, the mold and the energetic material shell are initially at the same temperature. The driving force to initiate solidification is brought by the temperature gradient arising from external convection from 1) water and 2) air from the top. Five different probe positions as illustrated in Figure 4.8 are investigated with their corresponding temperature histories shown in Figure 4.9. The cooling cycle for energetic materials is usually much longer than for metals owing to the inherent high Prandtl numbers (4.11) of these materials. In other words, they have a tendency to retain heat and diffuse it very slowly.

$$\text{Pr} = \frac{\text{momentum diffusivity}}{\text{thermal diffusivity}} = \frac{\mu c_p}{k} \quad (4.11)$$

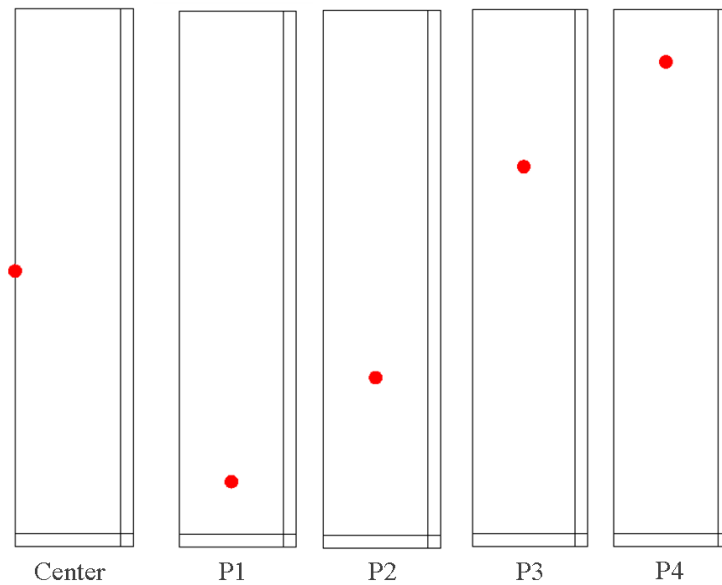


Figure 4.8 Different probe locations (half of geometry shown)

Another barrier to the overall cooling occurs as the mold and energetic material both contract, leading to separation. The gap formed offers some form of thermal resistance as depicted in (Figure 4.10) : in the vicinity of the detached mold and shell, the steepest temperature ramp is due to the air gap. However, the temperature difference across this gap is very small because the separation is very thin. Moreover, air has a larger thermal diffusivity than Composition B (Table 4.4) and thus, heat diffuses relatively fast in the gap. In fact, under transient conditions as it is the case here, the material property which governs the rate of heat removal is thermal diffusivity and in this respect, the overall cooling process mainly depends on the poor heat transfer in the Composition B melt rather than in the gap.

Table 4.4 Comparison of thermal diffusivities

	Composition B	Mold	Air gap
Thermal diffusivity, α m ² /s ²	1.31×10^{-7}	4.02×10^{-6}	2.14×10^{-5}

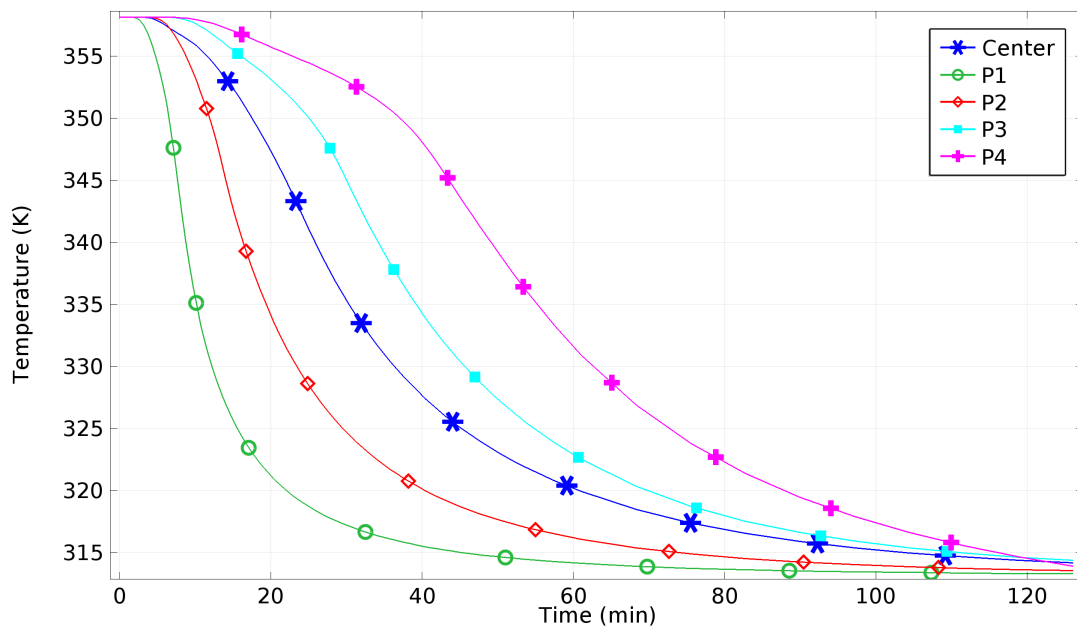


Figure 4.9 Temperature evolution at selected positions for the cylinder casting

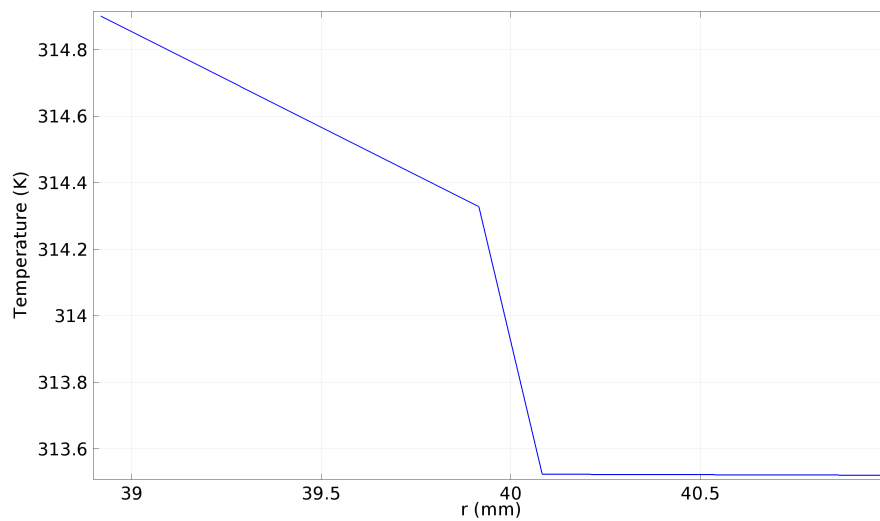


Figure 4.10 Radial temperature evolution at half the height of the cylinder and time $t = 50$ min

From Figure 4.11, we observe an appreciable delimitation i.e. solidification front between the solid (solid fraction equal to 1) and the liquid (solid fraction equal to 0) for different times; this implies that the solid front is well represented by the current solidification modeling

approach and our tailored solidification source terms and variables. The cooling conditions imposed as in Figure 4.7 lead to the very specific pattern depicted in Figure 4.11 and the growth of actually two solidification fronts. First, since the rate of heat removal induced by the water bath (higher heat transfer coefficient) is greater than that due to air flow at the surface of the cylinder, the primary solidification front moves upwards. In addition, it displaces laterally from the colder mold surface and towards the center. On the other hand, the development of the secondary front at the top of the cylinder is a result of chilling air convection only. This front develops at a much slower rate due to the weaker air convection and a relatively faster thermal diffusion in the *solid* Composition B chunk (at the bottom) than in the melt.

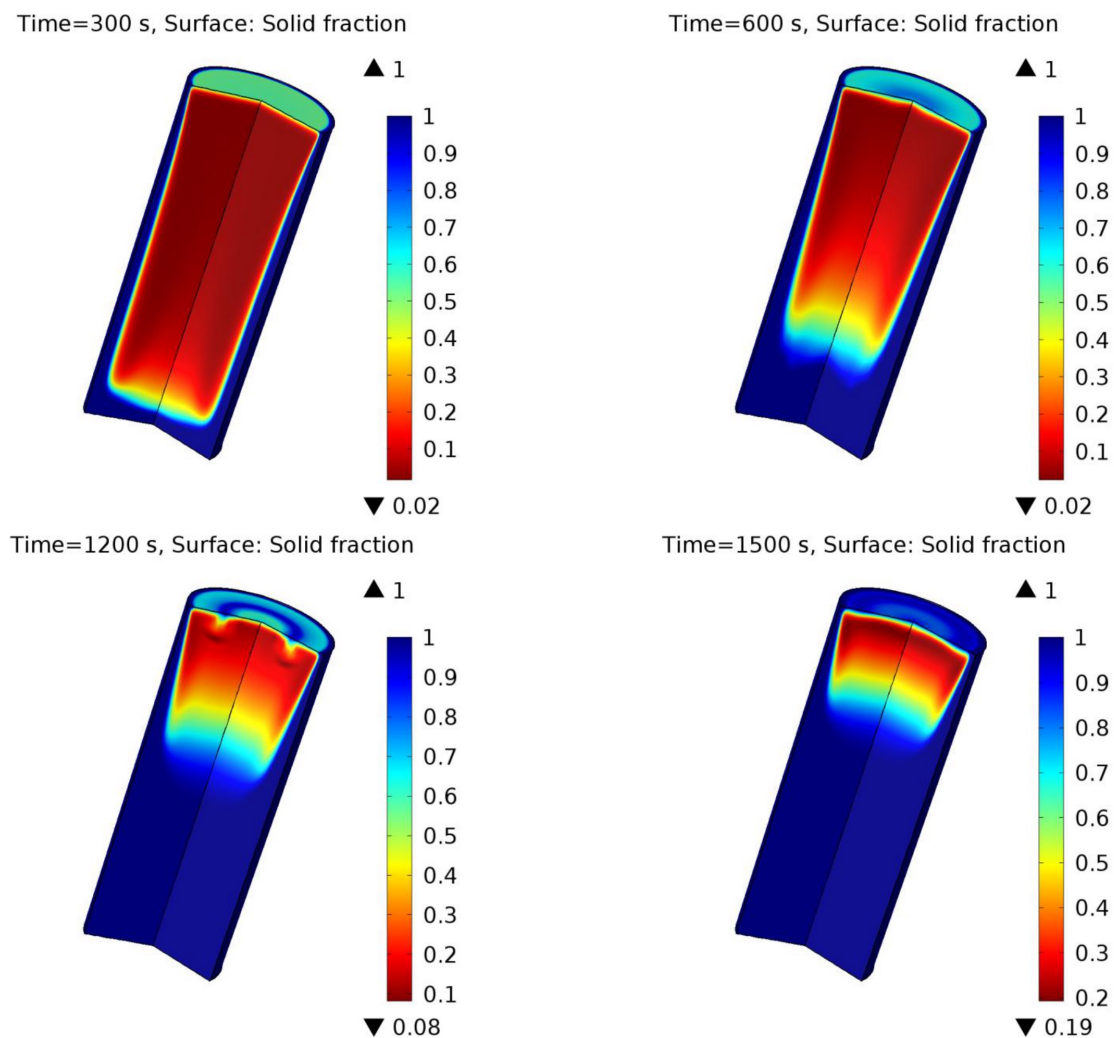


Figure 4.11 Evolution of the solid front (only explosive domain shown, mold walls omitted)

The fact that the cylinder casting shows full upward solidification under the imposed boundary conditions reinforces the statement that heat transfer in energetic materials casting is dominated by conduction. The mere effects of convection are mostly observed during the first stages of the process (maximum velocities reached $\approx 5.8 \times 10^{-4}$ m/s for the cooling conditions imposed). During this time, the difference between the bulk temperature of the energetic material and the solidification front (representing a solid surface) is highest. Buoyancy forces are appreciable until 600 seconds and a long natural convection cell is formed as illustrated by the red regions in Figure 12 (the black arrows represent the direction of melt flow). The overall velocities are however small in magnitude and Rayleigh numbers do not exceed 4×10^3 . This is well below the critical value for convection effects to play a major role in the overall heat transfer process. At 1200 seconds and beyond, there is very little melt convection; as observed in Figure 11 for 1200 and 1500 seconds, the non-solid part in the top is already mushy with a solid fraction starting at 8 % (at 1200 seconds) to 19 % (at 1500 seconds). This implies that the fluid in this mushy region is somehow impeded to move.

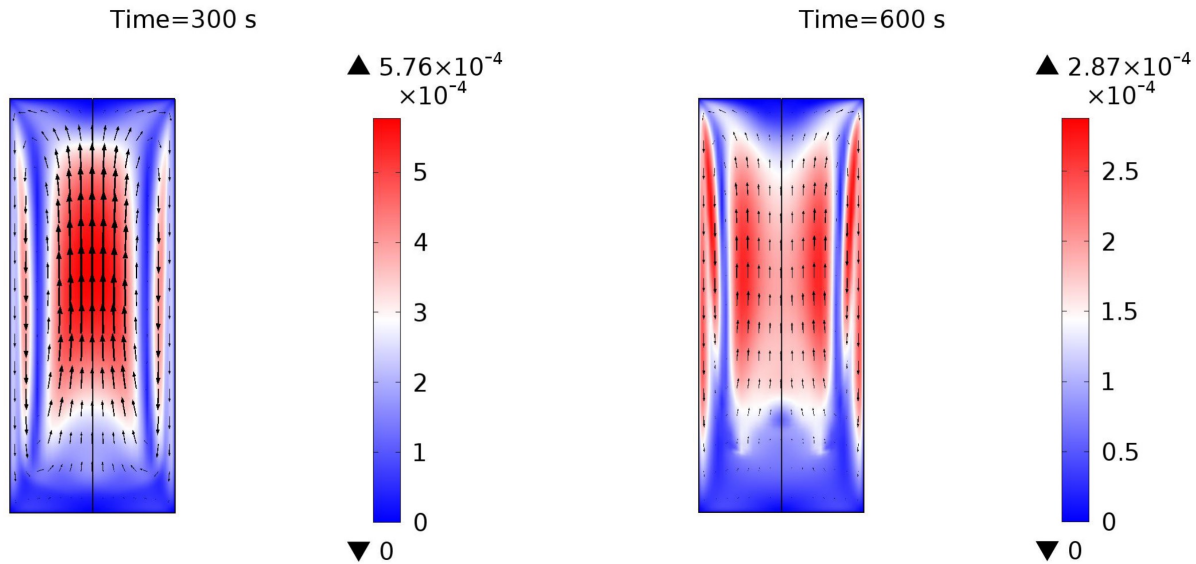


Figure 4.12 Velocity magnitude (coloured and in m/s) and velocity field direction (dark arrows) for selected times (only explosive domain shown, mold walls omitted)

The first stages of the process also correspond to the period of highest solidification rate because, for a similar reason as in the case of melt convection, it is at the beginning of the process

that the temperature between the melt and its surrounding environment is highest. From Figure 4.13, 90 % of the Composition B solidifies under 30 minutes before the solidification rate starts to wane significantly.

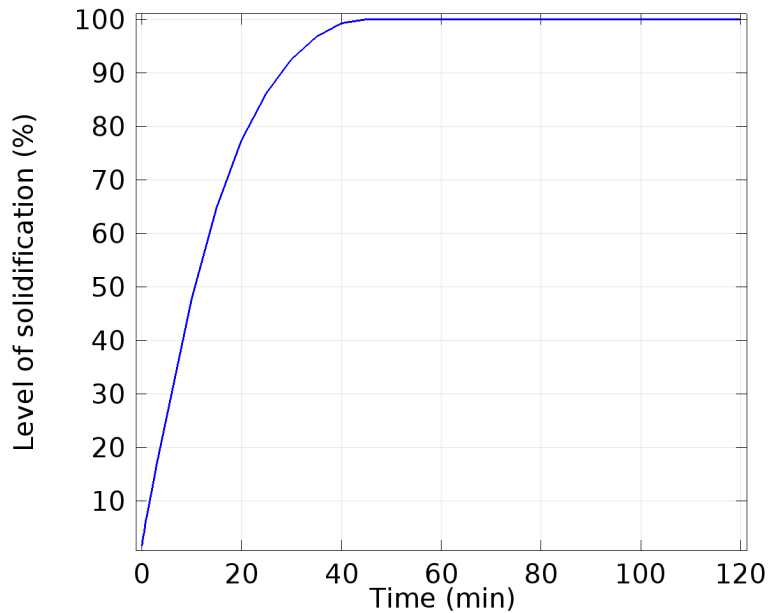


Figure 4.13 Evolution of the overall solidification process

4.3.1.2 Development and relaxation of thermal stresses

During the casting process, thermal stresses are induced both in the solidified casting (the molten state is stress-free in our analysis) and in the steel parts of the mold. The steep temperature gradients occurring during solidification are responsible for strains mismatch and the apparition of stresses in the casting. In addition, the difference in thermal expansion coefficients (Table 4.1 and Table 4.2) between the steel mold and the casting further contributes, and in a significant manner, to the residual stresses during the cooling process. Figure 4.14 shows the development of thermal stresses in the cast at different times. During early solidification (300 seconds), maximum stresses are aligned around the solidification front (refer to Figure 4.11) as a response to steep temperature gradients in this region. However, during cooling, we observe stress relaxation and besides, the location of highest stress is shifted to the interface between the casting and the mold as can be seen at 900 s, 1800 s and 4500 s.

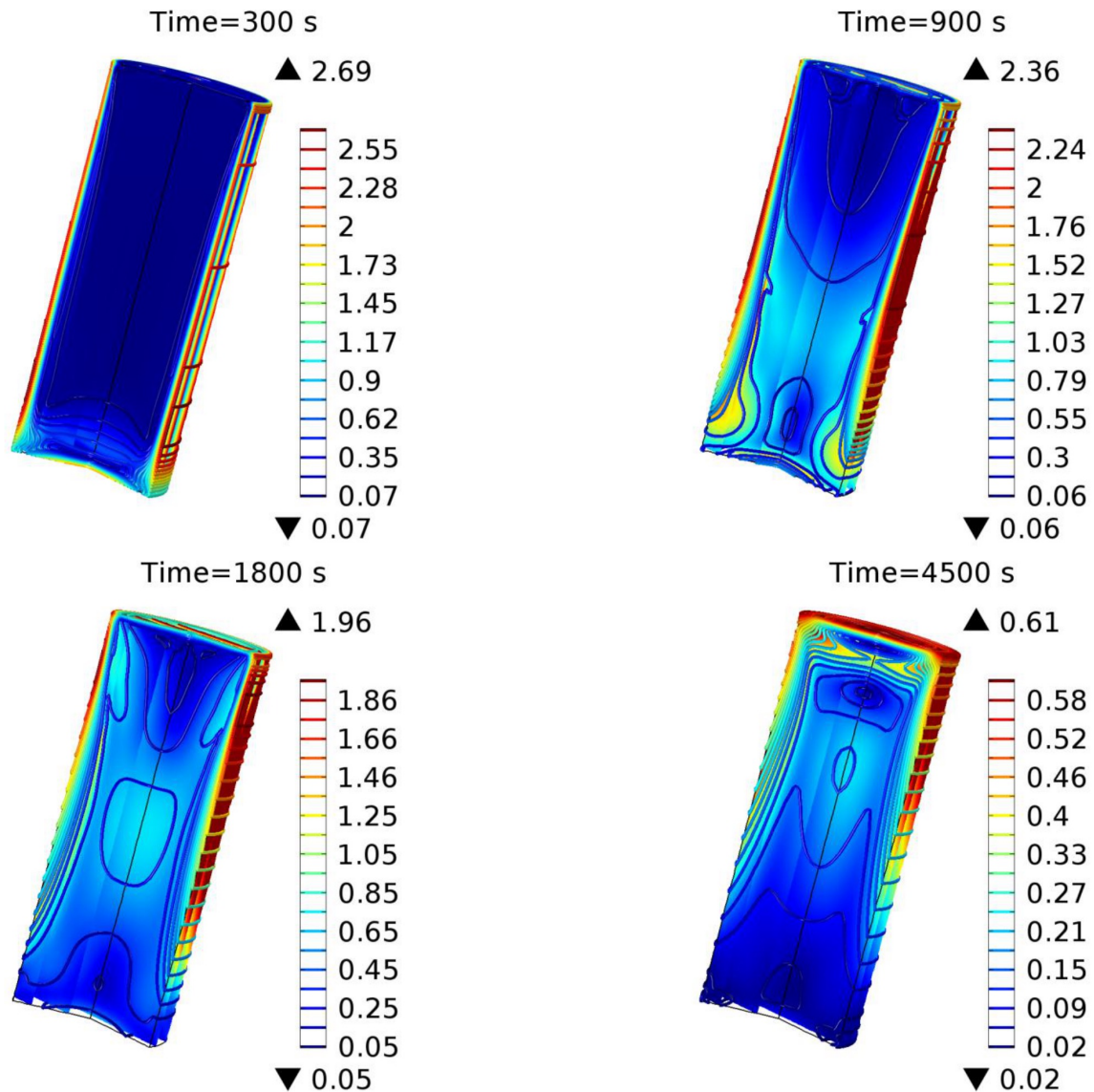


Figure 4.14 von Mises Stresses (color legend in MPa)

In fact, both the steel mold and casting contract but since the casting material has a higher expansion coefficient than the steel mold, it shrinks to a greater extent. As a result, this induces tensile stresses in the solidified shell and correspondingly, compressive stresses are induced in the mold. This is in fact true as long as there is a certain form of adhesion between the mold and the energetic material. Upon full separation, the holding force, which is very weak (tensile strength around a few 10^4 of Pa), is easily overcome, thereby accelerating the relaxation of residual stresses in the different parts of the casting and mold. Figure 4.15 shows the stresses at

two different times along the middle portion of the mold-shell interface (see insert), with a clear drop in residual stresses over time. The color legend represents the interface health such that at 4800 seconds, the gap size has exceeded the displacement at break for our customized adhesive force modeling (red portion along the 4800 s line). This corresponds to a zone where there is no more adhesive contact to the mold walls. It is worth noting that for this simplistic cylinder model, gap sizes are relatively larger than expected; the whole purpose of this phase of the simulation work being to confirm the modeling approach. A closer look to Figure 4.15 also suggests a zone of higher thermal stress at 300 seconds around the 30 mm height position. By comparing with Figure 4.11 and Figure 4.14 for the same instant, we observe that this is a region where there are two fast growing solidification fronts (lateral and upward) and therefore, the contributions due to the two steep thermal gradients may explain the stress peak of ~ 2.8 MPa shown in Figure 4.15.

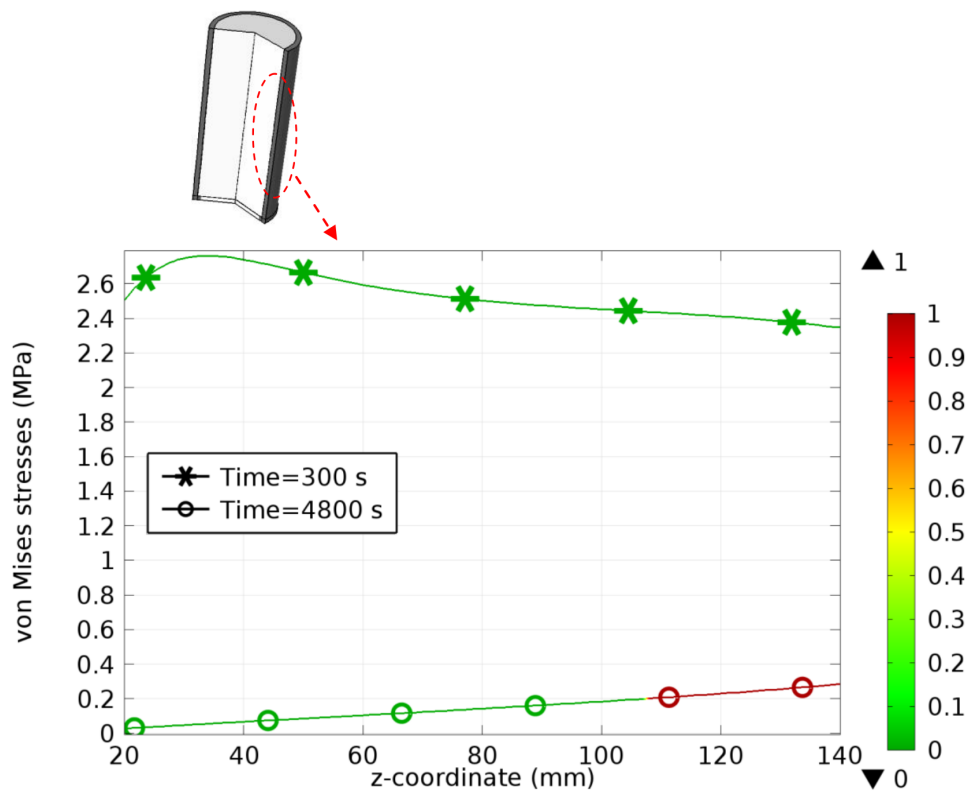


Figure 4.15 Evolution of gap at mold-shell interface and related stress level. The red color on the 2D plot indicates the region where the gap size has exceeded the displacement at break for the adhesive force (as opposed to the green portions)

Moreover, an interesting qualitative comparison proposed by Sun et al.(Sun et al., 2007) for the stresses in the steel mold and the cast is applicable in our case. It confirms that the residual stresses in the mold (a similar comparison can be carried out for the funnel) are about 40 times higher than in the casting:

$$\frac{\sigma_m}{\sigma_c} = \frac{(E\Delta T\alpha)_m}{(E\Delta T\alpha)_c} \approx \frac{(E\alpha)_m}{(E\alpha)_c} \approx 40 \quad (4.12)$$

Nonetheless, it remains of primary interest to control the residual stresses in the casting itself for quality purposes. In this respect, some vital information can be inferred from the cylinder simulation:

- High temperature gradients must be attenuated as far as possible - if solidification fronts are unavoidable, there are also other unbalanced thermal gradients which may appear during cooling. For example, in Figure 4.14, there is a higher stress level in the top middle section of the shell after 4500 seconds, which is related to an uneven temperature profile in the cast. Not only is the top portion hotter than the rest of the casting but it is also at a shorter distance to the cold periphery of the simulation domain (see dotted circle in Figure 4.16). The temperature gradient and thus, the residual stresses, are highest in this section of the casting.
- Since the adhesion to the mold walls is very weak, the apparition and growth of separation, if any, are mainly controlled by volume shrinkage.
- The simulation is extremely sensible to heat transfer boundary conditions. Abrupt changes lead to noise in the resolution of displacements and stresses (for example, at the top right corner of the casting where the material is at the same time exposed to air and adjacently to the steel mold).

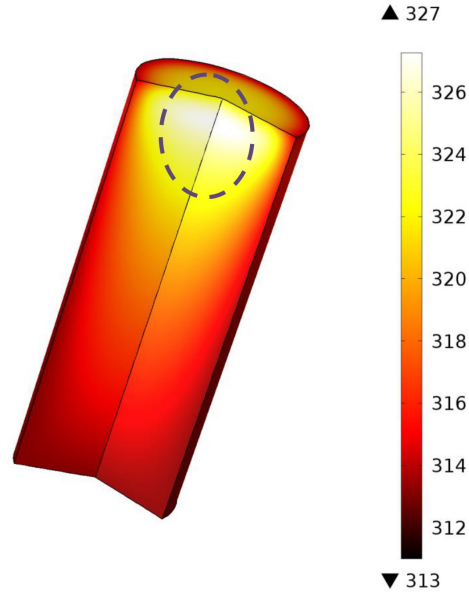


Figure 4.16 Temperature field (in K) at time $t = 4500$ seconds

4.3.1.3 Convergence investigation

A convergence analysis was set up for the cylinder casting simulation in the form of a mesh refinement study. The finest solution was considered to be closest to the real solution and hence, other levels of meshing were compared to this closest representation of the solution. Various process parameters were monitored and the study yielded excellent results regarding the convergence of the solution for a refinement from $rf = 1$ to $rf = 6$. For example, the maximum velocity was evaluated for different levels of meshes at 300 seconds, i.e. when convection effects are close to the overall process maximum (a half-interval $e = 8$ K was used for this set of simulations). The results suggested that a moderate-to-fine meshing ($rf = 4$) is more than enough for grid independence. Similar findings were observed with the average solid fraction where there is a gain of roughly 6.3 % in accuracy from the coarsest mesh ($rf = 1$) to the moderately fine mesh ($rf = 4$).

4.3.2 Generic 105 mm caliber casting

4.3.2.1 Experimental setup and validation of results

The second type of casting geometry studied in the course of this work is that of a typical 105 mm caliber. This entails a more rigorous formulation of the problem due to relatively complex, but realistic, boundary conditions. In fact, the external conditions to which the projectile is exposed here vary in time and position. For example, part of the projectile is immersed in a water bath, part of it is exposed to air in the basin while the rest is exposed to ambient air. Secondly, we also have to take into consideration that in actual melt casting processes, the initial values differ between the projectile, the shell and pouring funnel; most of the melt solidifies in the early stages for energetic materials (which is confirmed in our cylinder test model), hence there is a need for accurate measurement of boundary conditions. The relatively complex geometry of the 105 mm caliber further requires a very careful procedure for meshing and solver efficiency. It is necessary to have a fine mesh resolution at the interface between the different parts and use very small time steps at early stages in order to capture all the physics involved adequately.

To validate the simulation results, we were provided with the temperature profiles from six in-situ thermocouples resulting from thermal characterization experiments performed on a similar 105 mm caliber casting of Composition B. Figure 4.17 represents a general sketch of this casting experiment. The explosive was initially poured at 366.15 K through a stainless steel funnel at 348.15 K. The projectile was made of steel and a Santoprene rubber seal was used between the funnel and projectile. We also note that a hot probe was used during solidification and through the cooling process to control temperature variations. Further details on the importance of probe heating are exposed in section 4.3.2.2.

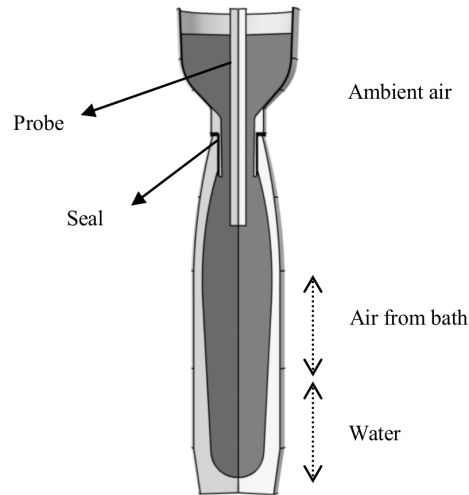


Figure 4.17 105 mm caliber casting with probe

From Figure 4.18, it is clear that there is a very good agreement between the experimental in-situ probes and the simulation results. In this respect, it is essential to properly characterize the quality of heat transfer (heat transfer coefficient h) throughout the casting process. We shall also point out that during casting, the temperature of the environment around the projectile (water bath, air) varies sensibly with respect to the overall temperature variation experienced by the casting. For instance, the temperature of the water bath can change by 10-15 K before equilibrium is achieved, while the casting cools by a range of 50-60 K. Since the time-dependency of external temperature must be considered, we used the information from additional probes which recorded the temperature of the surroundings - the air and water temperature evolutions were directly fed as boundary conditions in the model.

A combination of the aforementioned practices helped in validating the experimental results. The minor deviations observed in Figure 4.18 are due to variations in thermocouple data acquisition during the casting process (especially in the early stages). Difficulties in the characterization of the heat transfer coefficient in the regions where there are deviations can also be a cause. Moreover, concordance with temperature from thermocouples TC 2 and TC 3 was poor as it is believed the thermocouples were displaced in the course of the process, thereby distorting the results (based on the initial position of the thermocouples).

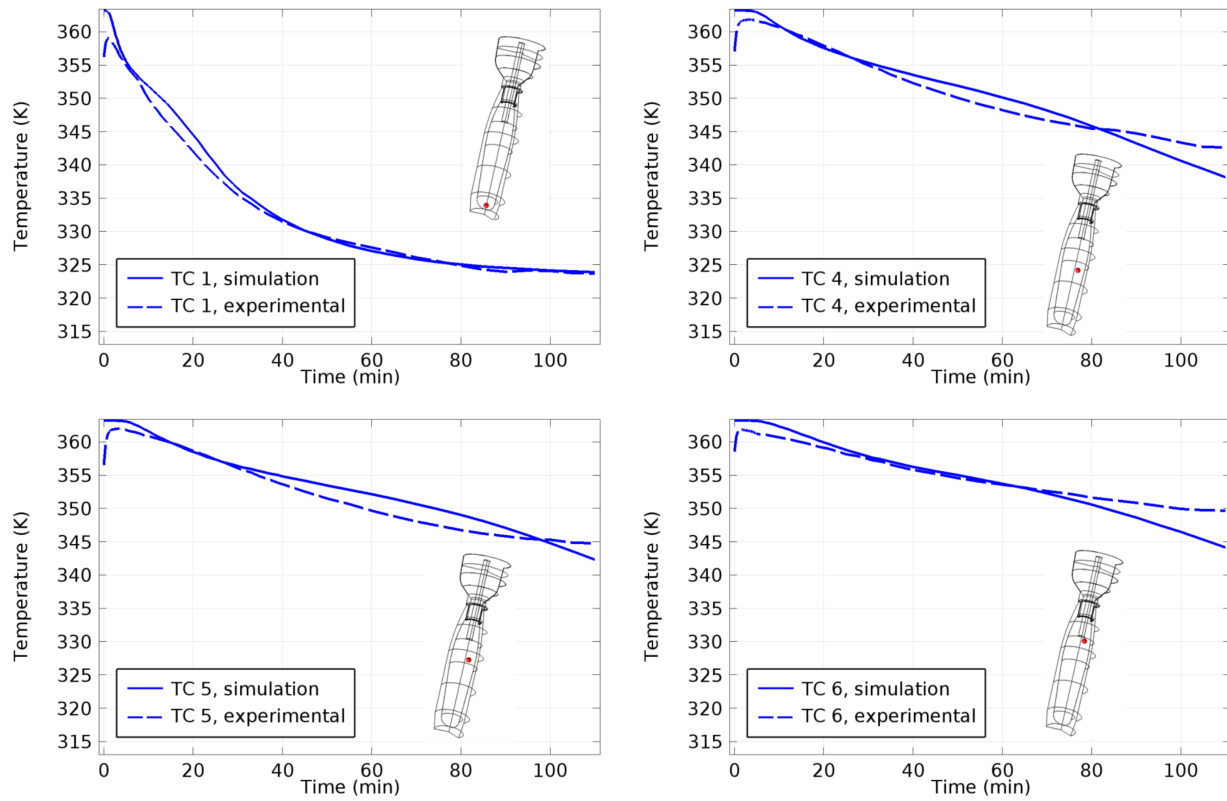


Figure 4.18 Comparison of temperature profiles between numerical and experimental results

4.3.2.2 Non-isothermal flow analysis

The more elaborated geometry of the casting and the special cooling conditions applied called for a more complicated solidification sequence in the case of the 105 mm caliber. Solidification is initiated (as for the cylinder test model) from the bottom and the sides, but this time, the presence of the water bath favours even more an upward mode of solidification. Once again, albeit a larger geometry, the high viscosity of Composition B confines melt convection to laminar flow. With $Ra \approx 6.1 \times 10^4$, there is no risk of hydrodynamic instabilities that may lead to a transition to turbulence.

There is however a need for controlled solidification, especially for the convection cells that arise along the vertical axis of the ammunition. Figure 4.19 below perfectly illustrates the argument as two cases of solidification are studied: with (a) and without (b) probe heating. The cooling conditions were kept identical for both simulations, except for the presence of the probe.

From Figure 4.19 (a), it is clear that hot probing increases the time delay before the explosive in the funnel (or top of projectile) solidifies. On the other hand, in Figure 4.19 (b), the convection cell in the center of the casting has broken up at 50 min, leaving behind a melt pocket (see (c)), which could potentially lead to void formation due to shrinkage. In practice, there are other alternatives to probe heating which can serve the same purpose - the use of heaters around the funnel and neck regions (Sun et al., 2005) is one of them; it is also possible to dip a cylindrical annulus into the funnel and maintain the funnel to the desired temperature.

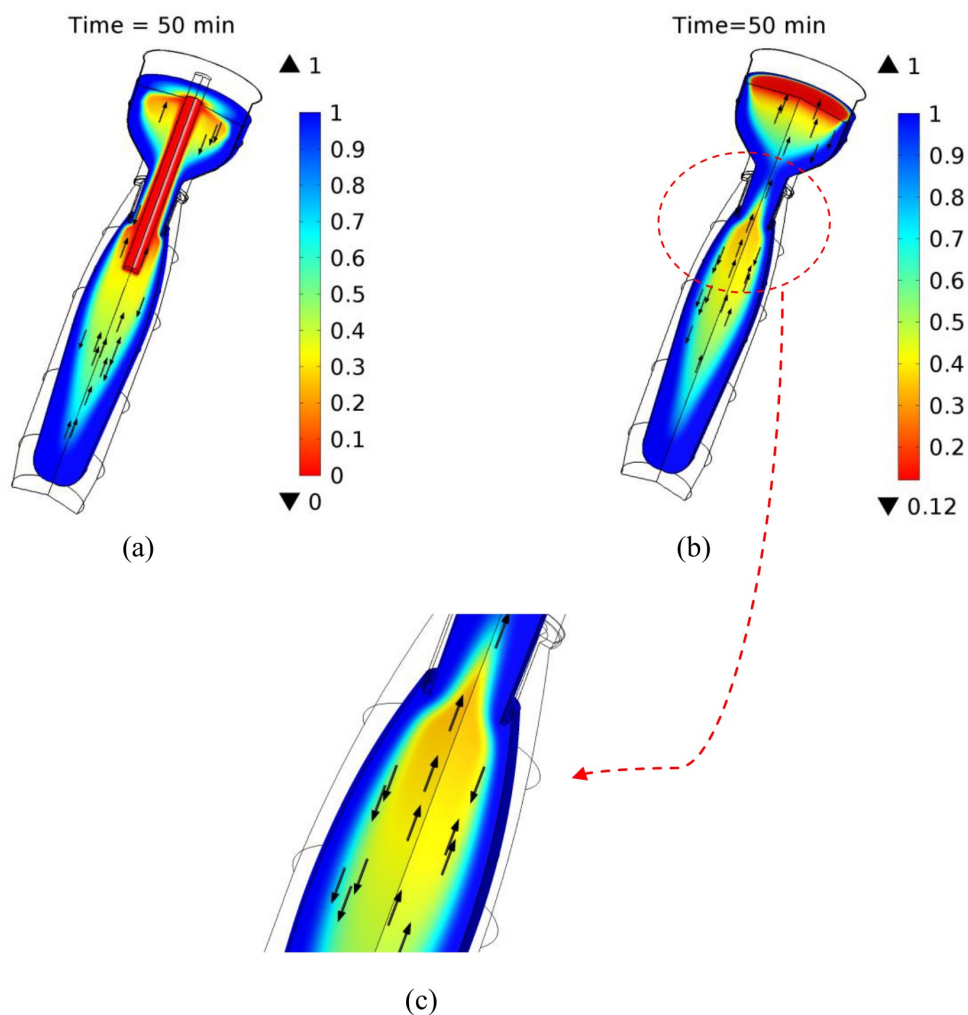


Figure 4.19 Solidification level (pure solid = 1) at 50 min for (a) casting with probe heating (b) without probe. Zoomed region in (c) with black arrows representing velocity field

4.3.2.3 Thermal stresses and effect of adhesion

As in the case of the cylinder, thermal stresses are induced during the cooling of the 105 mm casting. With the cast material identical (Composition B), the combination of temperature gradients and difference in mechanical properties between the cast and the other components of the system once again leads to a larger contraction of the energetic material compared to the steel parts. The mold is in fact relatively rigid and therefore its displacement is of less importance compared to the range of displacements for the casting material. Formation of gaps due to shrinkage is possible at some locations and it can even be enhanced by other factors such as gravity and the shape of the projectile. On the other hand, it can also be retarded by better contact in the form of good adhesion, high friction and contact pressure between the projectile and the shell surfaces.

In order to obtain a well defined solid mechanics problem, special boundary conditions are necessary for the 105 mm caliber casting simulation. First, it is assumed that the base of the projectile is in direct contact with the water bath and is therefore constrained vertically. We also have to integrate the CZM model as a boundary condition for each interface of interest, i.e. where there is adhesive contact with the casting. In this regard, it is worth pointing out that extra care is needed in the choice of the coordinate system used for the moving and separating interface: for accurate gap calculations, the CZM has to be defined locally according to the appropriate reference (material) frame of coordinates so that the adhesive force always acts perpendicularly to the interface. Moreover, in COMSOL Multiphysics, the Solid Mechanics Interface is equipped with a built-in deformed mesh functionality, which facilitates the calculation of stress and displacement fields within a Lagrangian frame of reference, as per continuum mechanics theory.

Figure 4.20 shows the residual stresses (Von Mises) after 65 min in the casting. In the absence of probe heating, the larger stresses at this instant are found in the shoulder region as depicted by the closer contour lines and the zoomed insert in Figure 4.20 (a). Furthermore, the maximum of 4.05 MPa is located at the edge of the funnel which can be explained by the fact that a sharp geometry is usually the locus of stress concentration. Figure 4.20 (b), on the other hand, illustrates a more uniform distribution of stresses over the casting. In fact, the contour lines are much more delocalized over the casting domain, and this is accompanied by a lower peak stress of 2.66 MPa as compared to case (a). This implies that probe heating, by providing a better

control of temperature gradients in the casting, has a positive outcome on the reduction of residual stresses.

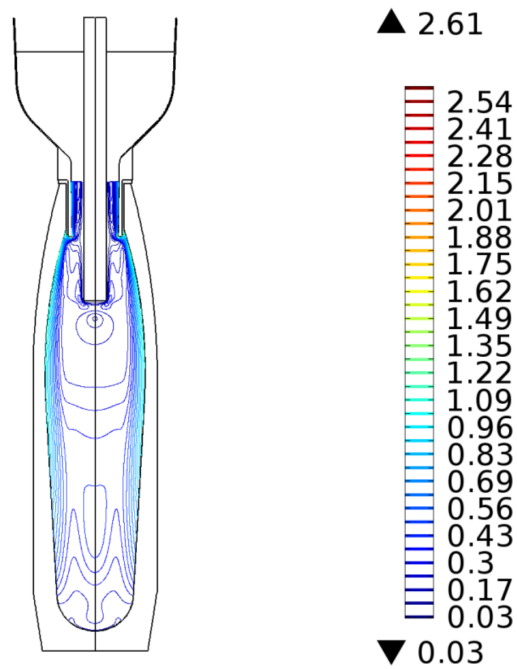
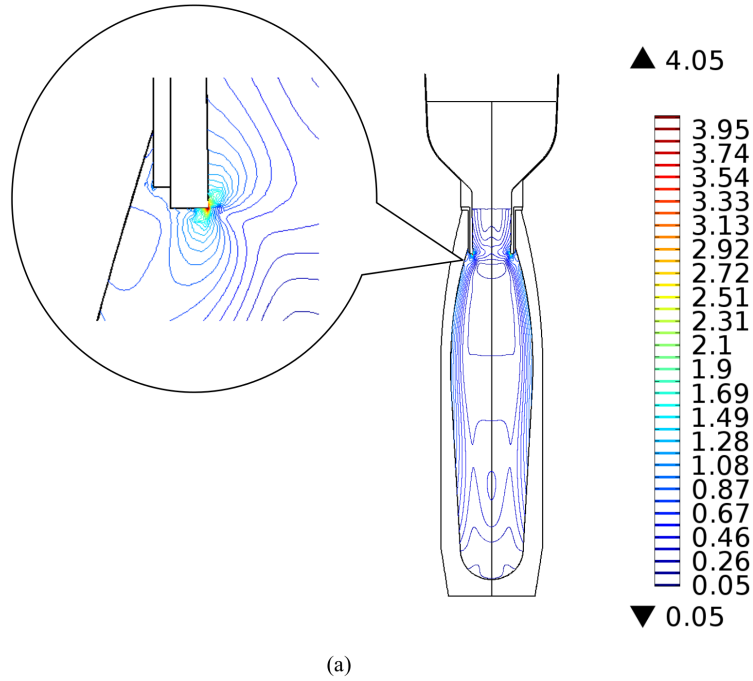


Figure 4.20 Von Mises stresses (in MPa) at 65 min for (a) without probe and (b) with probe

As with the cylinder model, due to contraction, there is some gap formation and this is mostly observed around the shoulder/neck region of the projectile (Figure 4.21). This means that the stresses induced in this region have been sufficient to overcome the adhesive contact, leading to separation. Preliminary experimental results for the adhesive strength suggest that it is very weak (a few 10^4 Pa) but further improvements to the testing are necessary for better characterization of the adhesion. Nonetheless, it is sufficient to have an impact on the size and localization of separation.

Gravitational forces also contribute to pulling away the solidified layer of energetic material away from the mold in the shoulder/neck region. In the absence of probe heating, the maximum separation predicted is 0.176 mm, which is in the range of values pertaining to similar works by Sun et al. (Sun et al., 2007). A more controlled cooling with the probe, on the other hand, leads to a 23 % reduction in the maximum gap. In addition, no apparent base separation was observed in the predictions and this is attributed to the gravitational forces working in the direction of the mold-shell interface, as opposed to the situation at the shoulder region.

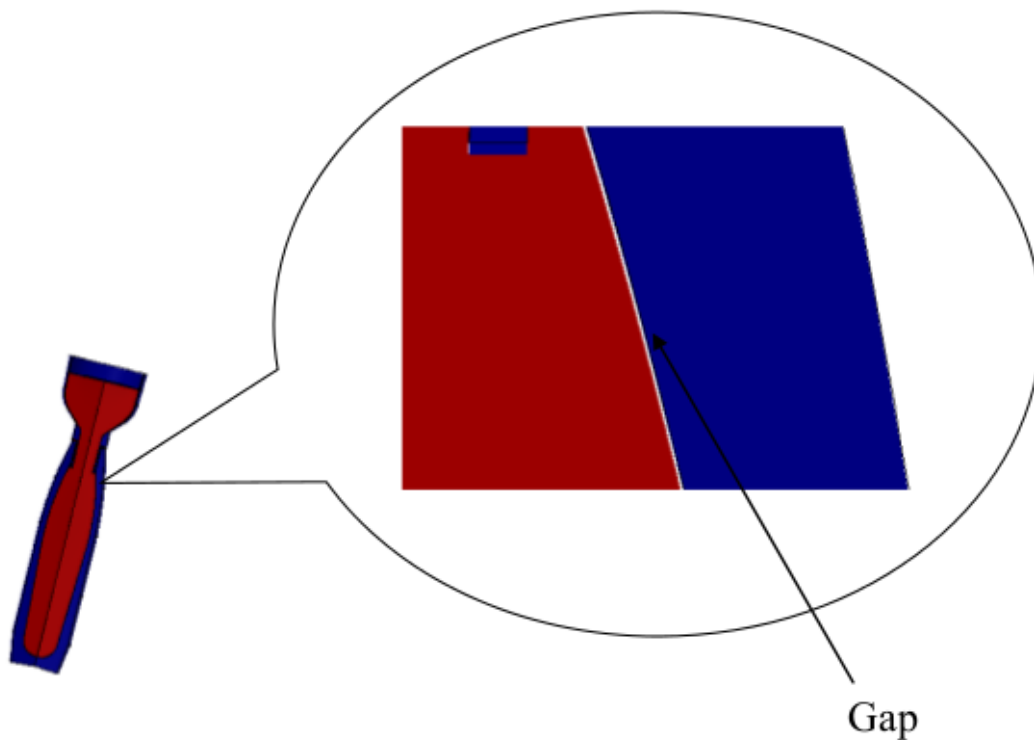


Figure 4.21 Formation of gap at shoulder position

4.4 Conclusions

A multiphysics modeling tool was built to represent the casting process of energetic materials. It included the effects of melt convection and the development of thermal stresses during cooling of the solidified shell. We also investigated the influence of adhesion to the walls of the mold/projectile and subsequent separation, if any, upon volume shrinkage. The modeling approach was verified and run for a simplified geometry (cylinder) before being validated against experimental results for an actual 105 mm caliber ammunition.

One of the chief points emerging from the study is the capacity of the model to reveal the importance of controlled solidification. The technique of probe heating was thoroughly emphasized as it delays solidification in critical parts of the projectile geometry to prevent formation of voids and excessive stresses. The apparition of gaps, which is due to volume shrinkage and loss of adhesive contact, was predicted at particular locations along the casting geometry. Key to the reduction of separation and residual stresses is the temperature gradient in the casting since it is intrinsically linked to the stress and displacement fields. Once again, it was shown that cooling conditions could be adjusted to have less steep temperature gradients and hence, lower residual stresses in the final cast.

Future works will include the study of other methods to optimize the cooling conditions such as changing the level of the water bath. Further characterization of the adhesion phenomenon will be tackled as well, along with the development of a full tribological formulation including friction. There are also ongoing investigations to simulate a full 3D model and even add the pouring step of melt-casting while accounting for the effect of possible entrapped air bubbles.

Acknowledgements

The authors are grateful to General Dynamics-OTS Canada for their technological and financial support in the course of this project.

CHAPITRE 5 DISCUSSION GÉNÉRALE

5.1 Le choix de la grille de calcul

La méthodologie employée pour implémenter le changement de phase est un élément clé de l'ensemble du projet. Dans le cas présent, elle est basée volontairement sur une méthode à grille fixe selon l'approche de Voller et Prakash (Voller & Prakash, 1987). En effet, un maillage adaptatif (ALE) ou une grille mobile serait certes plus précise dans le suivi du front de solidification et des propriétés matérielles dans le temps. Toutefois, ce type d'approche ne gère pas bien les interfaces (Mosser, 2012) ou géométrie complexes (COMSOL Multiphysics, communication personnelle, 7 octobre 2015). La méthode de grille fixe est donc choisie pour le changement de phase mais aussi dans l'optique d'éventuellement gérer un écoulement diphasique avec des bulles d'air qui se seront déformées et auront été emprisonnées pour former des poches dans le matériau énergétique. Du point de la déformation de la pièce solide, les contraintes et les déformations sont liées uniquement au gradient de température subi par la pièce solidifiée et elles sont résolues dans une formulation Lagrangienne grâce à la fonction de maillage déformé intégré du module *solid mechanics* de COMSOL; la déformation et la taille de la séparation sont très petites par rapport au volume de la pièce et ainsi, il est possible d'«accepter» la disparité entre grille fixe et grille mobile car c'est surtout la position de la séparation ainsi que l'ordre de grandeur qui nous intéressent.

5.2 L'influence de l'intervalle de température 2ϵ

Toujours concernant le changement de phase, il est aussi important de revenir sur l'influence de la taille de la zone trouble $2e$. Afin de bien représenter le front de solidification, il est nécessaire de choisir un intervalle qui est en mesure de capturer l'information du changement de phase correctement car en général, $2e$ est très petit devant la variation totale de température et cela peut s'avérer problématique pour l'intégration numérique en temps (Reddy & Gartling, 2001). Toutefois, de nos jours, en utilisant des algorithmes prédicteur-correcteur appropriés (souvent sur mesure), il est possible de pallier à cette difficulté. Dans le cas présent, il a été décidé d'utiliser une autre technique plus pratique, c'est-à-dire de tout simplement choisir un $2e$ plus large (Reddy et Gartling avaient d'ailleurs souligné cette possibilité). La Figure 5.1

démontre que plus l'intervalle 2ε est petit, plus les gradients de température à résoudre autour du front de solidification sont abrupts, aggravant ainsi la non-linéarité du problème. Un compromis doit être trouvé afin d'avoir un front de solidification représentatif de la physique du problème.

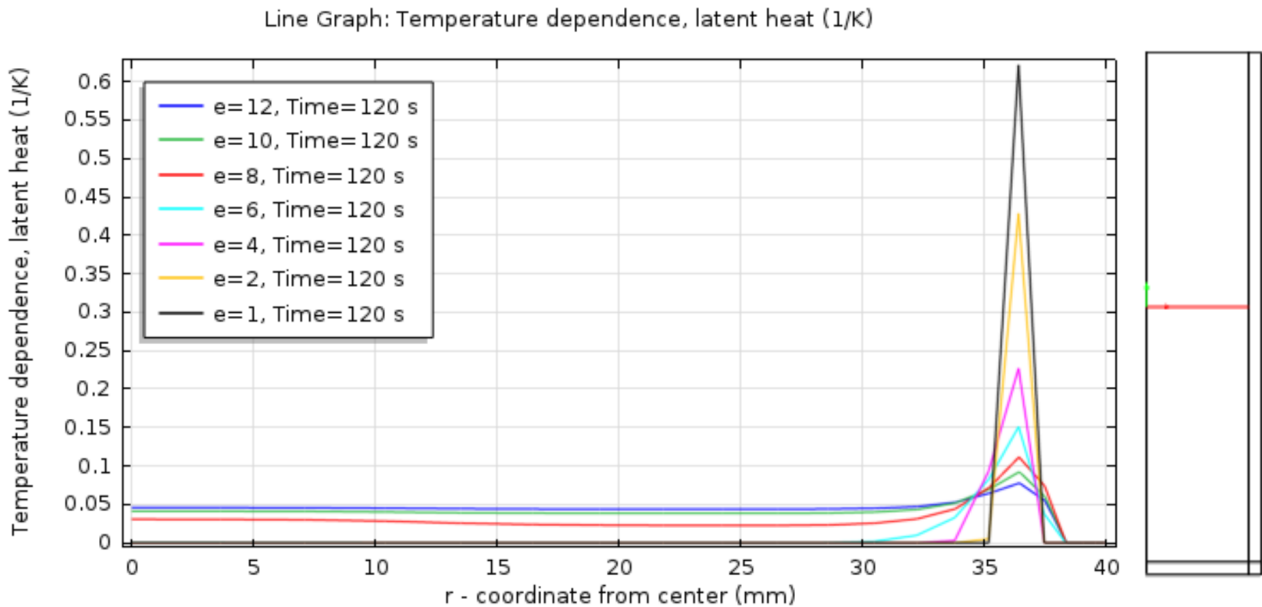


Figure 5.1 Dépendance de la température ($\frac{df_l}{dt}$) en fonction de la position radiale dans le cylindre et pour différents demi-intervalles e

5.3 Les retombées de l'étude de convergence

L'étude de convergence menée sur le modèle simple du cylindre a démontré qu'avec un raffinement du maillage, il était possible de tendre vers des valeurs constantes pour des paramètres particuliers. D'ailleurs, la section 4.3.1.3 de l'article explique qu'un maillage modéré à fin ($rf = 4$) était plus que suffisant pour le problème du cylindre ciblé ici. Dans les faits, après $rf = 4$, la vitesse maximale dans le modèle stagne à $5.4 \times 10^{-4} m/s$ et le niveau de solidification à 25.4 % au temps $t = 5 \text{ min}$ (Cas où les effets de convection sont relativement plus élevés). Il est important de noter ce qui ressort de ce type d'étude de convergence car il s'agit d'un élément central de la FEM et qui nous permet de vérifier que l'erreur entre la solution approximative par éléments finis et la solution réelle est maintenue à une tolérance acceptable.

5.4 Difficultés de mesure de l'adhérence

Dans le contexte des projectiles dont il est question dans cette étude, il est très difficile d'obtenir une valeur quantitative de l'adhérence. À notre connaissance, nous sommes les premiers à présenter un protocole tel que décrit à la section 3.4 afin de tenter de mesurer l'adhérence de manière quantitative. En général, il est plus facile de caractériser l'adhérence de façon qualitative, c'est-à-dire, en appliquant la même force/effort à plusieurs échantillons et en examinant visuellement les faciès de rupture. Cela permet ainsi de qualifier l'adhérence de forte ou faible, dépendamment de la surface de l'explosif encore collé aux parois du projectile.

Dans les tests de traction personnalisés entrepris dans ce travail de recherche (Figure B.1), seuls quatre échantillons ont pu être préparés pour les tests de traction. Un de ces quatre échantillons s'est décollé pendant qu'il était monté sur la mâchoire de la machine de traction et il a donc naturellement été éliminé du test (une des causes probables est que l'échantillon n'avait pas suffisamment séché pour qu'il y ait adhérence). Dans un deuxième temps, puisqu'il s'agissait de la première fois que de tels essais étaient entrepris, l'échantillon 921-10-4-5 a d'abord été testé afin de pouvoir ajuster les paramètres du protocole. Par exemple, la précontrainte appliquée initialement (921-10-4-5A) n'était pas adaptée au test (pas de cassure - voir Tableau 5.1) et ainsi, le même échantillon a été soumis une deuxième fois au test avec une précontrainte plus adaptée (921-10-4-5B). Ce dernier ayant déjà été sollicité, il s'est brisé prématurément.

Tableau 5.1 Examen qualitatif des échantillons

Échantillon	Observation-type de cassure
921-10-4-5A	Aucune cassure, test annulé
921-10-4-5B	Cassure prématurée
921-10-4-1	Cassure côté projectile
921-10-3-5	Cassure côté projectile

Néanmoins, cet échantillon sacrifié a permis d'ajuster les paramètres de traction pour les échantillons 921-10-4-1 et 921-10-3-5. Les résultats des analyses ont permis d'extraire des informations importantes pour le CZM, notamment la résistance maximale à la traction. Certes, il est nécessaire de conduire de nouveaux tests et de modifier la procédure expérimentale afin d'obtenir des résultats plus précis pour la mesure d'adhérence. Il serait notamment pertinent de

couper plus d'échantillons pour avoir un ensemble de données plus représentatif. De plus, de nouvelles pistes sont à explorer pour contrôler plus sensiblement l'effort de traction.

5.5 Limites du modèle développé

En dépit de sa flexibilité, le modèle demeure rigide lorsqu'il s'agit de traiter des propriétés matérielles qui varient beaucoup en fonction de la température. C'est sans doute une conséquence liée à la forte non-linéarité du problème, qui plus est, dans un contexte transitoire. En effet, le modèle comprend déjà plusieurs aspects agrémentant la non-linéarité tels que le changement de phase, le contact adhésif et la résolution contraintes-déformations. Pour alléger la non-linéarité, il était souvent nécessaire d'avoir recours à un lissage très soigné des fonctions représentant la variation des propriétés. Dans certains cas, il était nécessaire d'utiliser une valeur moyenne afin de pallier à cette difficulté tout en respectant au mieux la physique du problème.

Par ailleurs, il était encore difficile à ce stade d'inclure une composante diphasique au modèle complet et où il serait possible d'étudier l'influence de poches d'air par rapport au développement de contraintes mécaniques dans la pièce. En effet, il y a beaucoup de variabilité dans les résultats préliminaires obtenus pour le modèle diphasique avec bulles d'air. De plus, la question de la conservation de la masse dans des limites acceptables demeure.

CHAPITRE 6 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

Un modèle de simulation numérique est proposé dans ce projet de recherche pour représenter le cycle de refroidissement lors de la mise en œuvre d'explosifs. Le modèle est flexible, facile d'utilisation et intègre plusieurs phénomènes physiques impliquées lors du refroidissement d'un obus militaire. En particulier, un projectile de 105 mm est étudié pour un matériau test connu dans l'industrie de la défense, soit la Composition B. Le traitement délicat du processus de changement de phase y est scrupuleusement documenté. De plus, un des apports novateurs de cette recherche est le traitement numérique d'un contact adhésif en régime transitoire dans la simulation de la coulée de matériaux énergétiques.

Une approche de vérification et de validation (V&V) a aussi permis d'assurer que l'on résolve les bons phénomènes physiques de la bonne façon. Dans un premier temps, l'approche de modélisation a été vérifiée grâce à un problème de référence. Ensuite, le modèle numérique a été bâti pour une géométrie simple - un cylindre. Durant cette phase de la recherche, une étude de convergence a aussi été entreprise et elle a démontré qu'avec un raffinement du maillage, on tendait vers des valeurs constantes pour la vitesse maximale dans le et le niveau de solidification.

Par la suite, la validation du problème a été amenée par une comparaison suffisamment cohérente entre des profils de température simulés et des résultats expérimentaux pour un obus de 105 mm. Il faut néanmoins concevoir des déviations mineures à certains endroits qui sont dues d'une part, à une variation dans l'acquisition de données durant l'expérience (plus particulièrement durant les premières minutes) et d'autre part, à une mauvaise approximation de la variation du coefficient de convection h . Les simulations entreprises ont aussi permis d'obtenir un certain nombre de résultats qui pointent, notamment dans la prévention de la formation de vide ou de porosités par l'entremise de techniques comme l'usage d'une sonde thermique. Le modèle prédit également que ce type de pratique pour réguler le cycle de refroidissement permet de diminuer les contraintes résiduelles et le retrait excessif (réduction maximale de 23 % prédite). L'ensemble de ces attributs du projet sont des retombées positives pour notre partenaire industriel, notamment pour le département R & D dans un premier temps.

Travaux futurs:

À la lumière des résultats émanant du projet, plusieurs voies sont à explorer, autant pour l'amélioration que pour l'apport de nouvelles idées. Premièrement, il serait pertinent de tester le modèle pour de nouvelles formulations explosives telles que le IMX-104, qui est déjà prisee dans l'industrie de la défense pour le remplacement de la composition B, à cause de sa faible sensibilité. Il est également possible de bonifier le traitement du contact entre l'obus et l'explosif solide. En effet, un modèle tribologique plus complet réunissant à la fois la pression de contact, le frottement et l'adhérence pourrait être une piste à explorer. L'idée d'un montage expérimental spécial pour créer et mesurer le retrait serait aussi une approche à considérer afin de vérifier les résultats de simulation par rapport à la taille de l'interstice et donc, sans avoir à dépendre de valeurs de la littérature, déjà très rares.

Enfin, les résultats du calibre de 105 mm en 2D axisymétrique ouvrent la voie vers le développement d'un modèle 3D de l'obus militaire. C'est dans cet ordre d'idées qu'il serait aussi intéressant d'intégrer la composante d'écoulement diphasique au modèle complet. Ceci permettrait non seulement d'étudier l'influence de poches d'air dans la pièce mais elle laisse également entrevoir la possibilité de concevoir un modèle comprenant coulage et refroidissement.

RÉFÉRENCES

- Aberg, J., Vynnycky, M., & Fredriksson, H. (2005). *Modelling of thermal stresses in industrial continuous casting processes*. Communication présentée à COMSOL Multiphysics User's Conference, Stockholm.
- Adams, G. G., & Nosonovsky, M. (2000). Contact modeling - forces. *Tribology International*, 33(5-6), 431-442. doi: Doi 10.1016/S0301-679x(00)00063-3
- Aksak, B., Hui, C.-Y., & Sitti, M. (2010). The effect of aspect ratio on adhesion and stiffness for soft elastic fibres. *Journal of the Royal Society Interface*, 8(61), 1166-1175.
- Barenblatt, G. (1962). Mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. *Advanced applied mechanics journal*, 7(55-129).
- Bellet, M., & Thomas, B. G. (2007). Solidification Macroprocesses (Modeling of stress, distortion and hot tearing). Dans *Materials Processing Handbook*.
- Bergman, T. L., Incropera, F. P., & Lavine, A. S. (2011). *Fundamentals of heat and mass transfer*. John Wiley & Sons.
- Boley, B. A., & Weiner, J. H. (1960). *Theory of Thermal Stresses*. New York.
- Bonacini, C., Comini, G., Fasano, A., & Primicerio, M. (1973). Numerical Solution of Phase-Change Problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16 1825-1832.
- Bussetta, P., Marceau, D., & Ponthot, J.-P. (2012). Résolution du problème de contact mécanique frottant : méthode du lagrangien augmenté adapté. *Computational mechanics*, 49(2), 269-275.
- Cahn, J. W., & Hilliard, J. E. (1958). Free energy of a nonuniform system. I. interfacial free energy. *J. Chem. Phys.*, 28(2), 258-267.
- Carslaw, H. J., & Jaeger, J. C. (1959). *Conduction of Heat in Solids* (2^e éd.). Oxford: Oxford University Press.
- COMSOL. (2012). How to deal with Contact problems, Adhesion.
- Coulouarn, C., Aumasson, R., Lamy-Bracq, P., & Sta, F. (2013). *Focus on the melt-cast technology - Main properties of XF®11585*. Communication présentée à ICT 2013, 44th, Karlsruhe.
- Cruchaga, M. A., Celentano, D. J., & Lewis, R. W. (2004). Modeling fluid-solid thermomechanical interactions in casting processes. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 14(2), 167-186. doi: <http://dx.doi.org/10.1108/09615530410513791>
- Dugdale, D. S. (1960). Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8 100-104. doi: 10.1016/0022-5096(60)90013-2
- Encyclopedia of Explosives and Related Items. Dans (vol. Vol. 3).
- Fortin, A., & Garon, A. (2011). *Les éléments finis: de la théorie à la pratique*. Laval, Québec: Université Laval.

- Gartling, D. K. (1980). Finite element analysis of convective heat transfer problems with change of phase. Dans K. Morgan (Édit.), *Computer Methods in Fluids* (p. 257-284). London: Pentech.
- Gibbs, T. R., & Popolato, A. (1980). *Last Explosive Property Data*.
- Glimm, J., Grove, J., Lendquist, B., McBryan, O. A., & Tryggvason, G. (1988). The bifurcation of tracked scalar waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(1), 61-79.
- Harlow, F. H., & Welch, J. E. (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8(12), 2182-2189.
- Heniche, M. (1995). *Modelisation tridimensionnelle par elements finis d'écoulements à surface libre*. (Université de Technologie de Compiègne).
- Hertz, H. (1882). Über die Berührung fester elastischer Körper.
- Hetnarski, R. B., & Eslami, M. R. (Édit.). (2009). *Thermal Stresses-Advanced Theory and Applications* (vol. 158). Waterloo, Ontario, Canada: Springer.
- Jacqmin, D. (1999). Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics*, 155(1), 96-127.
- Jiji, L. M. (2009). *Heat Conduction*: Springer Berlin Heidelberg.
- Johnson, K. L., Kendall, K., & Roberts, A. D. (1971). Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 324(1558), 301-313.
- Koric, S., & Thomas, B. G. (2006). Efficient thermo-mechanical model for solidification processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 66 1955-1989. doi: 10.1002/nme.1614
- Kronbichler, M. (2012). *Computational Techniques for Coupled Flow-Transport Problems*. (Université d'Uppsala, Uppsala, Suède). (162215)
- Lamy-Bracq, P., & Coulouarn, C. (2009). *Modelling of melt-cast cooling and solidification processes for explosives*. Communication présentée à COMSOL Conference, Milan.
- Marin, T. L. (2006). *Solidification of a Liquid Metal Droplet Impinging on a Cold Surface*. Communication présentée à Comsol Conference, Boston.
- Mosser, P. A. (2012). *COMPARAISON DE MÉTHODES DE DÉTECTION DU VORTEX DANS DES CUVES AGITÉES*. (Université de Montréal, Montréal).
- Mudryy, R., & Nastac, L. (2013). *Computational Multi-Phase Modeling of Cast Energetic Materials*. Communication présentée à TMS Annual Meeting, San Antonio.
- Osher, S., & Sethian, J. A. (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton–Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1), 12-49.
- Pelletier, P., Laroche, I., Lavigne, D., FrankCantin, Brousseau, P., & Fung, V. (2009). Processing Studies of DNAN Based Melt-Pour Explosive Formulations.

- Peskin, C. S. (1977). Numerical Analysis of blood in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25(3), 220-252.
- Reddy, J. N., & Gartling, D. K. (2001). *The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics*. Boca Raton, Florida, US: CRC Press.
- Russo, G., & Smereka, P. (2000). A remark on computing distance functions. *Journal of Computational Physics*, 163 51-67.
- Sun, D., Annapragada, S. R., Garimella, S. V., & Singh, S. K. (2007). Analysis of Gap Formation in the Casting of Energetic Materials. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications: An International Journal of Computation and Methodology*, 51(5), 415-444. doi: 10.1080/10407780600878933
- Sun, D., Garimella, S. V., Singh, S., & Naik, N. (2005). Numerical and Experimental Investigation of the Melt Casting of the Explosives. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 30(5), 369-380. doi: 10.1002/prop.200500028
- Sussman, M., Smereka, P., & Osher, S. (1994). A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 114 146-159.
- Talon, C., & Curnier, A. (2003). A model of adhesion coupled to contact and friction. *European Journal of Mechanics, A/Solids*(22), 545-565.
- Varela, A. E. (2008). *Application of the level set method for a cavity-filling simulation on Modelling and Simulations*. Communication présentée à 19th IASTED International Conference, Quebec City, Quebec, Canada (p. 223-227).
- Voller, V. R., & Prakash, C. (1987). A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(8), 1709-1719.
- Volokh, K. Y. (2004). Comparison between cohesive zone models. *COMMUNICATIONS IN NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING*, 20 845-856. doi: 10.1002/cnm.717
- Wang, D., Xie, Z., Sun, W., & Huang, Y. (2011). Solidification Simulation of Melt-cast Explosive under Pressurization. *Materials Science Forums*, 704-705 71-75.
- Weiner, J. H., & Boley, B. A. (1963). Elasto-plastic thermal stresses in a solidifying body. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11 145-154.
- Wu, S. (1982). *Polymer interface and adhesion*. New York.
- Yue, P., Feng, J. J., Liu, C., & Shen, J. (2004). A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 515 293-317.

ANNEXE A - COMPARAISON ET SOLUTION SEMI-ANALYTIQUE DU PROBLÈME TEST DE SOLIDIFICATION

Ci-dessous, la comparaison entre la solution semi-analytique de la température et celle obtenue par éléments finis sur COMSOL Multiphysics. Pour la solution approximée par éléments finis, le maillage est constitué d'une série géométrique de 300 nœuds en x (voir Figure 3.2) car le problème peut être réduit à une dimensionnalité de 1 (problème 1D) pour la solution en température. Il en ressort que les résultats par éléments finis et ceux de la solution semi-analytique concordent.

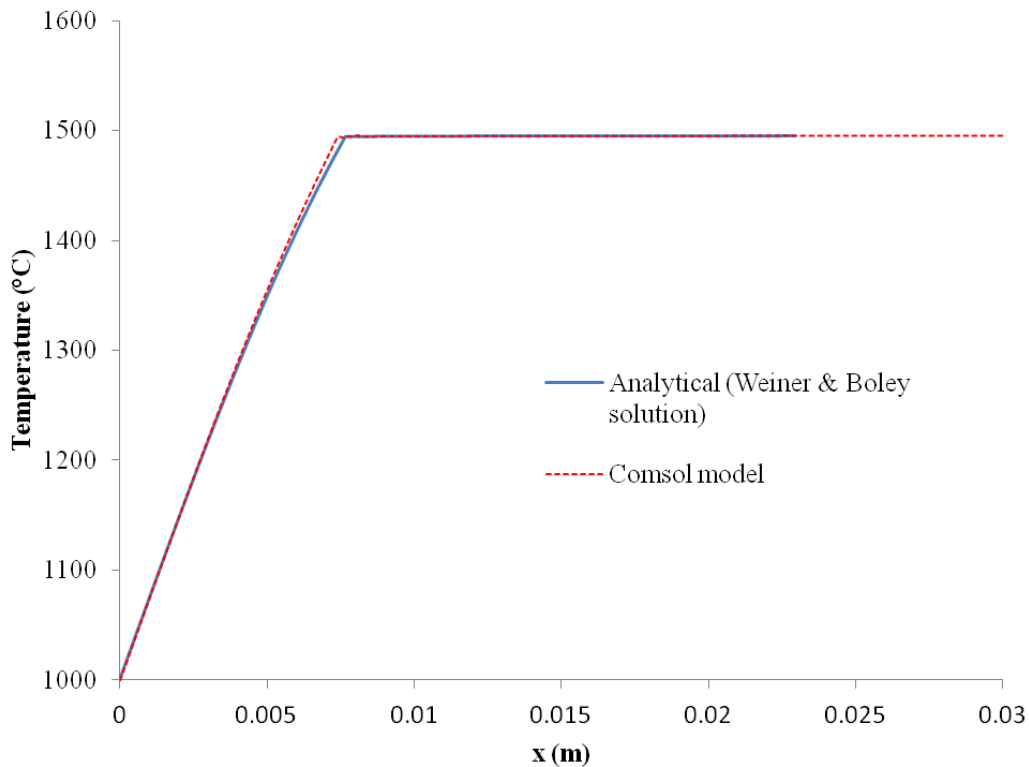


Figure A.1 Profils de températures comparés pour le problème de Weiner et Boley

Le script MATLAB original par l'auteur de ce mémoire et utilisé pour la solution semi-analytique:

```
%*****
% Titre: Weiner_boley_solution.m
%
% Fonction: Produire la solution semi-analytique du problème de
%           solidification de Neumann's basé sur les valeurs tests
%           de Weiner et Boley
%
% Auteur: Warren Sanhye
%
% Date: 22 septembre, 2014
%*****

%%*****
% INITIALISATION DES VARIABLES
%*****

clc
clear all
close all

% Paramètres

Tm_s = 1494.35;      % Solidus
Tm_l = 1494.45;      % Liquidus
Tm = (Tm_s + Tm_l)/2; % Température de fusion/solidification
Tw = 1000;           % Température à la paroi
T0 = Tm - Tw;         % Différence entre la température de fusion et celle
à la paroi
Ti = 1495;           % Température initiale (liquide)

L = 0.03;            % Longueur (m)
rho = 7500;          % Masse volumique (kg/m^3)
k = 33;              % Conductivité thermique (W/(m*K))
Cp = 661;            % Chaleur spécifique (J/kg/K)
deltaH = 272e3;      % Chaleur latente (J/kg)
poiss = 0.3;         % Coefficient de Poisson
Esolid = 40e9;        % Module d'élasticité dans le solide (Pa)
Eliquid = 14e9;       % Module d'élasticité dans le liquide (Pa)
beta = 2e-5;         % Coefficient de dilatation thermique (1/K)
yi_zero = 20e6;       % Contrainte seuil à Tw (Pa)
alpha = k/(rho*Cp);   % Diffusivité thermique (m^2/s)

% Variables

t = 21;              % variable de temps (s)
T = [];              % Température (°C)

%*****
```



```

%                               SOLUTION DE TEMPÉRATURE                               *
%*****

lambda = 0;
e = 0.001;

LHS = exp(-lambda^2)/erf(lambda) - ((Ti - Tm)/(Tm - Tw))*(exp(-lambda^2)/(1 -
erf(lambda)));
RHS = sqrt(pi) * deltaH * lambda / (Cp * (Tm - Tw));

while abs(LHS - RHS) > e
    lambda = lambda + e;
    LHS = exp(-lambda^2)/erf(lambda) - ((Ti - Tm)/(Tm - Tw))*(exp(-
lambda^2)/(1 - erf(lambda)));
    RHS = sqrt(pi) * deltaH * lambda / (Cp * (Tm - Tw));
end

p = lambda * 2 * sqrt(alpha);
Lbar = (p*sqrt(t));
xbar = 0:(Lbar/100):Lbar;
xbarl = Lbar:(Lbar/100):L;

% Profil de température dans la portion solidifiée
Ts = Tw + ((Tm - Tw)/erf(lambda)) * erf(xbar/sqrt(4 * alpha * t));

% Profil de température dans la portion encore liquide
Tl = Ti + ((Tm - Ti)/(1 - erf(lambda))) * (1 - erf(xbarl/sqrt(4 * alpha *
t)));

figure(1)
subplot(1,2,1)

% Graphique du profil de température
t = num2str(t);
first = [' t = ' t ' s'];
xbar = xbar * 1000; % en mm
xbarl = xbarl * 1000; % en mm
xT = [xbar xbarl];
T = [Ts Tl];
plot(xT, T);
legend(first, 'location', 'SouthEast');
title('Température en fonction de la distance x');
xlabel('Distance de la paroi froide (mm)');
ylabel('Température (°C)');

%*****
%                               SOLUTION DE CONTRAINTES                               *
%*****

% Fontion de la contrainte seuil
yi = yi_zero * (T - Tm)/(Tw - Tm);

% Définitions des paramètres
m = (1-pois) * yi_zero / (beta * Esolid * T0); % adimensionnel

```

```

mliquid = (1-pois) * yi_zero / (beta * Eliquid * T0); % adimensionnel

D = 1 / erf(lambda);

x0 = [0.2 0.1];
options=optimset('Display','iter'); % Option pour voir la résolution de
fsolve
[zeta,fval,exitflag] = fsolve(@(x) SimEq(x,m,lambda),x0,options);
xi = zeta / lambda;

% Adimensionnnel
x1 = 0:(xi(2)/100):xi(2);
S1 = m * (D * erf(lambda * x1) - 1); % Pour 0 < x < xi2

x2 = xi(2):((xi(1) - xi(2))/100):xi(1);
S2 = m * (1 - D * erf(zeta(1))) + D * (erf(zeta(1)) - erf (lambda .* x2))...
    - (2/sqrt(pi)) * D * (1 - m) * zeta(1) * exp(- zeta(1)^2) *
log(zeta(1)./(lambda * x2)); % Pour xi2 < x < xil

x3 = xi(1):((1 - xi(1))/100):1;
S3 = m * (1 - D * erf(lambda * x3)); % Pour xil < x < 1

% Transformation dimensionnelle
x1 = x1 * Lbar; % en m
x2 = x2 * Lbar; % en m
x3 = x3 * Lbar; % en m
xliq = Lbar:(L-Lbar)/20:L;

S1 = S1 * beta * Esolid * T0 / (1 - pois) / 1e6; % en MPa
S2 = S2 * beta * Esolid * T0 / (1 - pois) / 1e6; % en MPa
S3 = S3 * beta * Esolid * T0 / (1 - pois) / 1e6; % en MPa
Sliq = 0 * xliq;
S = [S1 S2 S3 Sliq];

% Graphique du profil de contraintes
subplot(1,2,2)

x1 = x1 * 1000; % en mm
x2 = x2 * 1000; % en mm
x3 = x3 * 1000; % en mm
xliq = xliq * 1000; % en mm
xS = [x1 x2 x3 xliq];

plot(xS,S);
legend(first,'location','SouthEast');
title('Contrainte en fonction de la distance x');
xlabel('Distance de la paroi froide (mm)');
ylabel('Contrainte (MPa)');
L = L * 1000; % en mm
axis([0 L -25 15]);

```

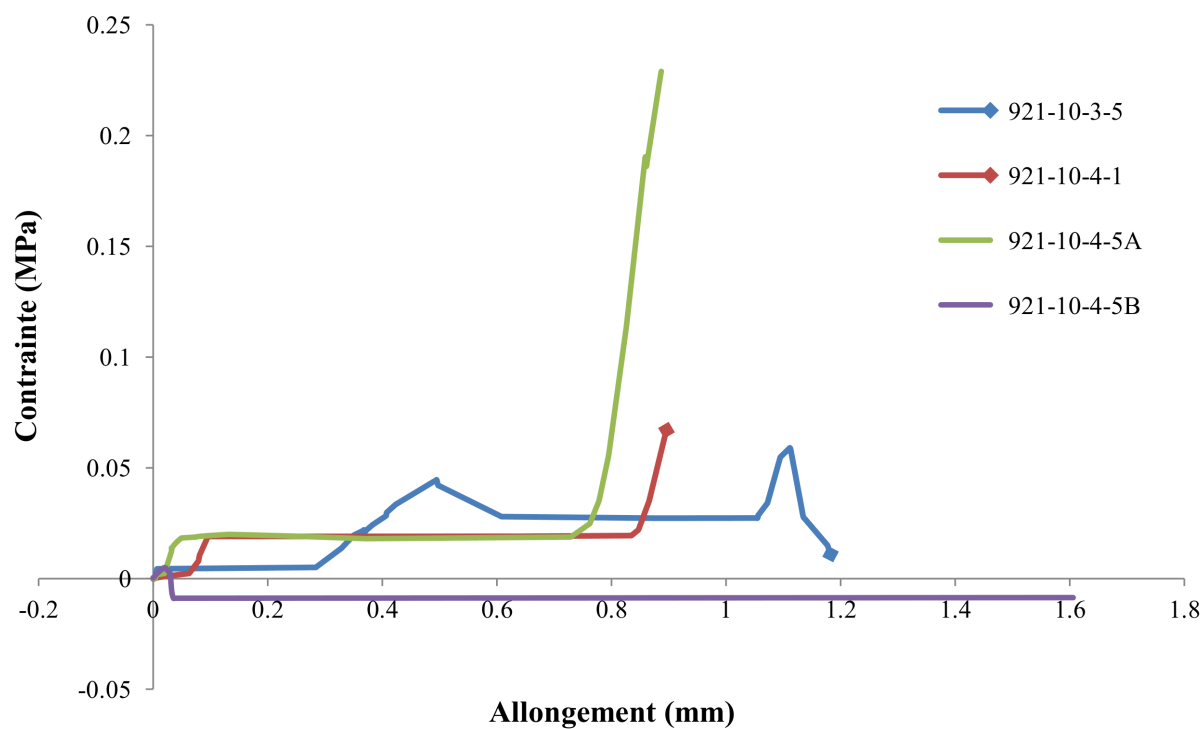
ANNEXE B - COURBES DE TRACTION

Figure B.1 Courbes de traction pour tests d'adhérence

ANNEXE C - CODE DE GÉNÉRATION DE BULLES/SPHÈRES

Ci-dessous, le script MATLAB, par l'auteur de ce mémoire, pour créer des géométries aléatoires représentant des sphères/bulles:

```
function [matrice_bulles,R] = coord_bubbles( d_moy,sigma,c,H,L )
%*****
% Titre: geometry_bubbles.m
%
% Fonction: Créer une géométrie rectangulaire et y générer un ensemble de
%           bulles disposées de manière aléatoire.
%
% Auteur: Warren Sanhye
%
% Date: 29 juillet, 2014
%*****

%%*****
%           INITIALISATION DES VARIABLES
%*****

% Pour exprimer le rayon moyen et l'écart type en mètres

d_moy = d_moy/1000;
sigma = sigma/1000;

% On suppose une distribution log-normale pour la taille des bulles

ln_mean = log((d_moy^2)/sqrt(sigma^2 + d_moy^2));
ln_sd = sqrt(log(1 + (sigma/d_moy)^2));

% Dimension du domaine (moule) en mètres
H = H/1000;
L = L/1000;

A_domaine = L * H;

% La table des diamètres admissibles pour les bulles
N = 0;
c = c/100;
err_relative = 0.01; % entre la concentration nominale et celle calculée
c_calc = 0;

while (c - c_calc)/c > err_relative

    % Nombre de bulles à insérer
    N = N + 1;
    ln_D(N) = ln_mean + ln_sd.*randn();
    D(N) = exp(ln_D(N));
    c_calc = (pi * sum((D/2).^2))/A_domaine;

end

R = D ./ 2;
```

```

% Affichage des concentrations (ne devraient pas être très différentes)
fprintf('Concentration nominale: %g %% \n',c * 100);
fprintf('Concentration calculée: %g %% \n',c_calc * 100);

% Définition du domaine modifié pour éviter que des bulles se retrouvent hors
des frontières L X H
H_min = max(R);
H_max = H - max(R);
L_min = max(R);
L_max = L - max(R);

% Autres variables
n = 1; % Décompte du nombre de bulles insérées
essai_max = 1000; % Nombre d'essais maximal possible pour insérer une bulle

%%*****
%                               BOUCLE DE GÉNÉRATION DES BULLES                               *
%%*****

% Coordonnées du centre de la première bulle
x_c = L_min + (L_max - L_min) * rand();
y_c = H_min + (H_max - H_min) * rand();
R_assigned(n,1) = R(n);

matrice_bulles = [x_c y_c]; % la matrice qui contient les coordonnées des
centres de toutes les bulles

% Autres bulles
n = n + 1;
essai = 1; % Premier essai pour insérer la n ième bulle

while essai <= essai_max

    collision = 0; % On suppose l'état de non-collision

    while n <= N && collision == 0

        % On génère les coordonnées du centre de la n ième bulle
        x_c = L_min + (L_max - L_min) * rand();
        y_c = H_min + (H_max - H_min) * rand();
        R_assigned(n,1) = R(n);

        % Et on vérifie qu'il n'y a pas de collision avec les autres bulles
        norm = sqrt((x_c - matrice_bulles(:,1)).^2 + (y_c -
matrice_bulles(:,2)).^2);

        if any(norm <= (R_assigned(n) + R_assigned(1:end-1))) % Il y a
collision

            collision = 1;
            essai = essai + 1; % Essai supplémentaire pour tenter de placer
la n ième bulle

```

```

        else % la bulle ne touche aucune autre bulle

            matrice_bulles = [matrice_bulles;x_c y_c]; % On ajoute ses
            coordonnées à la matrice de stockage des coordonnées des bulles
            n = n + 1; % On passera à la bulle suivante à la prochaine
            itération

            if n > N

                essai = essai_max + 1; % Pour arrêter la boucle sur le nombre
                d'essais permis

            end

        end

        if essai > essai_max
            fprintf('nombre maximal d''essais atteint pour placer la %g ième
            bulle\n',n);
        end

    end
end
end

```

Ci-dessous, le script MATLAB, par l'auteur de ce mémoire, pour écrire la géométrie des bulles aléatoire dans un fichier COMSOL:

```

function out = model
% Model exported on Aug 8 2014, 16:59 by COMSOL 4.3.2.152.

import com.comsol.model.*
import com.comsol.model.util.*

model = ModelUtil.create('Model');

model.modelPath(['C:\Users\warren\Documents\Poly\MA'
native2unicode(hex2dec('00ce'), 'Cp1252') 'TRISE\RECHERCHE\Multiphase
flow']);

model.modelNode.create('mod1');

model.geom.create('geom1', 2);

model.mesh.create('mesh1', 'geom1');

```

```

%Saisie des paramètres du moule par l'utilisateur
Largeur = input('Largeur du moule (mm):');
Hauteur = input('Hauteur du moule (mm):');

%Saisie des paramètres des bulles par l'utilisateur
d_moyen = input('Diamètre moyen des bulles (mm):'); % Diamètre en mm
ecart_type = input('Écart type de la distribution des bulles (mm):'); % écart
type en mm
concentration = input('Pourcentage de bulles (%):');

% Vérification pour la cohérence des paramètres de bulle utilisées
nombre_bulles = concentration * Largeur * Hauteur/100/pi/((d_moyen/2)^2);

while nombre_bulles < 1

    disp(' ');
    fprintf('Fraction d''air/diamètre trop grand;\nle volume occupée par
l''air dépasse les limites physiques du moule\n');
    fprintf('Veuillez réinsérer de nouveaux paramètres\n');
    disp(' ');
    d_moyen = input('Diamètre moyen des bulles (mm):'); % Diamètre en mm
    ecart_type = input('Écart type de la distribution des bulles (mm):'); %
écart type en mm
    concentration = input('Pourcentage de bulles (%):');

end

% Appel à la fonction coord_bubbles pour générer les coordonnées des centres
des bulles
[coor,rayons] =
coord_bubbles(d_moyen,ecart_type,concentration,Hauteur,Largeur);

% Boucle pour générer la géométrie de bulles dans un fichier Comsol
for i = 1:size(coor,1)

    circle("Encyclopedia of Explosives and Related
Items,")=strcat('c',num2str(i));
    model.geom('geom1').feature.create(circle{i},'Circle');
    model.geom('geom1').feature(circle{i}).setIndex('pos', coor(i,1), 0);
    model.geom('geom1').feature(circle{i}).setIndex('pos', coor(i,2), 1);
    model.geom('geom1').feature(circle{i}).set('r',rayons(i) );
    model.geom('geom1').run(circle{i});

end

% Sauvegarde de la géométrie dans un fichier Comsol spécifique
mphsave(model, ['C:\Users\warren\Documents\Poly\MA'
native2unicode(hex2dec('00ce'), 'Cp1252') 'TRISE\RECHERCHE\Multiphase
flow\bubbles'])
out = model;

```